

非线性量子力学

Nonlinear Quantum Mechanics

庞小峰 著

電子工業出版社

Publishing House of Electronics Industry

北京 · BEIJING

内 容 简 介

本书是研究在非线性系统中微观粒子的运动特性和规律方面的科学。全书内容丰富,涵盖了量子力学的一些基本问题。在宏观量子效应的实验结果和本质分析的基础上,书中研究了微观粒子的运动规律和特性。对于态的非线性叠加原理、表象变换的傅里叶关系、微扰理论、量子化理论、定态与本征值理论和相对论性理论进行详细描述,阐明了非线性量子力学发展的必然性、作为新理论的正确性和普适性。此外,详细剖析了在非线性量子力学中演绎微观粒子所具有的波-粒二象性,及粒子的碰撞、散射和相互作用的特性。并涉及通过自相互作用、自聚焦、自陷和自凝聚等机制产生的非线性相互作用的特点及其实验证实。在阐明求解非线性量子力学问题的方法之后,研究在有机分子、蛋白质大分子和氢键物理系统等实例中的激子、质子和声子等微观粒子的非线性量子力学特征及求解方法。总之,全书构筑了一个完备的体系框架,综合阐明了非线性量子力学理论。本教材为任课教师提供免费的电子教学课件。

本书可作为物理学、化学、生物物理学、电子学和天体及地球物理等专业高年级本科生和研究生教材,也可作为相关科研人员的参考书。

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究。

图书在版编目(CIP)数据

非线性量子力学 / 庞小峰著. —北京: 电子工业出版社, 2009.7
(研究生教育书系)

ISBN 978-7-121-08693-9

I. 非… II. 庞… III. 非线性力学: 量子力学—研究生—教材 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2009)第 062365 号

策划编辑: 段丹辉

责任编辑: 史 平

印 刷:

装 订:

出版发行: 电子工业出版社

北京市海淀区万寿路 173 信箱 邮编 100036

开 本: 720×1000 1/16 印张: 20.75 字数: 406 千字

印 次: 2009 年 7 月第 1 次印刷

定 价: 58.00 元

凡所购买电子工业出版社图书有缺损问题, 请向购买书店调换。若书店售缺, 请与本社发行部联系, 联系及邮购电话: (010)88254888。

质量投诉请发邮件至 zltts@phei.com.cn, 盗版侵权举报请发邮件至 dbqq@phei.com.cn。

服务热线: (010)88258888。

序 言

所谓非线性量子力学，就是研究在非线性系统中微观粒子运动特性和规律的科学。创建人庞小峰在深入研究原有量子力学的基本原理与理论及其宏观粒子效应本质的基础上，突破了量子力学的线性特性和系统哈密顿算符与粒子状态波函数无关等基本假设，从粒子与粒子之间或粒子与背景场之间的相互作用得出了客观存在的非线性相互作用。并且，将系统的哈密顿算符和相应动力学方程表示成非线性形式，从而从根本上改变了微观粒子的特性。在求导宏观量子效应与粒子的孤子运动特性和非线性作用的关系中，依据低温超导、超流及现代孤子理论，在原有量子力学的基础上建立起了非线性量子力学这一新兴学科。其中的两条基本原理表征了非线性系统中微观粒子的状态、特性以及其遵守的动力学方程和所对应的哈密顿算符。在这些原理的基础上建立起了态的非线性叠加原理、表象变换的傅里叶关系、微扰理论、量子化理论、定态与本征值理论、散射与碰撞理论和相对论性理论等。因此，非线性量子力学的实验基础是宏观量子效应，它的理论基础是超导与超流理论和现代孤子理论。从这些原理和理论得出了在非线性量子力学中的微观粒子是局域的，有一质心，既具有确定的能量、动量和质量，满足经典运动方程、哈密顿和拉格朗日方程以及经典碰撞规律，其坐标和动量在一定程度上可同时确定，遵守最小测不准关系等粒子特性，又具有诸如反射、散射、透射和衍射等的波动特性。因此，非线性量子力学是迥然不同于线性量子力学的。其原因是粒子具有的非线性相互作用抑制和抵消了动能的色散效应，从而使粒子局域为一个孤子，于是表现出波-粒二象性。这与德布罗意的波-粒二象性关系式和微观粒子的单缝与双缝衍射结果以及人们对粒子的概念相吻合。

只要我们认真和全面地考虑由两个或多个粒子或物体组成的系统中所有粒子的真实运动及它们之间的相互作用，则在系统中一定会有非线性相互作用出现。这就是说，所有的物理系统包括最简单的氢原子都存在非线性相互作用。虽然各个系统所具有的非线性作用有强有弱，但即使是非常弱的非线性作用的系统也应当用非线性量子力学，而不能用线性量子力学描述微观粒子。这意味着非线性量子力学是最普适和正确的理论，是量子力学发展的必然结果和非线性领域中的正确形式。原有的线性量子力学仅是它的一种近似，仅能描述单一粒子的运动或非线性作用和微观粒子群速度都趋于零或非线性作用等于零的物理系统中微观粒子的特性和运动规律。

本书作者庞小峰研究非线性量子力学始于 20 世纪 80 年代初。在近 30 年的研究历程中,庞小峰在 *Phys. Rev*, *European. Phys. Journal*, *Chem. Phys. Lett*, *J. Phys. Chem. Solid*, *Mod. Phys. Lett*, *Physica*, *Int. J. Mod. Phys.*, *Phys. Stat. Solid*, *Common. Theor. Phys*, *Chinese. Phys. Lett*, *Chinese Phys. Fonth of Chinese Phys*, *Nature Science* 等十多种国内外刊物上发表 100 多篇学术论文;并于 1985 年撰写了《非线性量子力学的一些问题》的讲义,于 1994 年在重庆大学出版社正式出版了 121 万字的学术专著《非线性量子力学理论》,于 2005 年在 World Scientific Publishing Corporation 出版了 650 页的英文专著 *Quantum Mechanics in Nonlinear Systems*, 在全世界广泛销售;并在 2009 年以 70 篇幅的文章 *The Behaviours and Properties of Microscopic Particles in nonlinear systems* 载入位于 New York 的 Nova Science Publishers Inc. 编辑的专著 *Solitons, Research, Technology and Application* 中。这一理论及其结果也在德国、捷克、斯洛伐克和新加坡等国及国内的几十所高等学校和研究所广泛演讲过,也在多个国际及国内专业会议上报告和讲解过。这些专著出版后,国外的 Dan Grecu, H.J.W. Miller-Kirsten 和 Ye Yeo 等学者以及国内的崔洪农和周凌云等多名物理学教授颇为关注,在多个刊物上撰写了多篇论文评论这些专著。特别是专栏专著评论家 Dan Grecu 先生在美国出版的著名评论刊物 *Mathematical Reviews* 上用了很长的篇幅,全面系统地评论了这一英文专著的价值和意义。最后得出结论:“作者提出的理论是恰当和充分的”,“这本专著是一本很好的文献,其中还包含了大量有价值的参考文献,并对物理学上具有重要意义的众多系统给予了令人注意和完整的描述”,“是一本非常有用的专著”。因此,现在出版的这本《非线性量子力学》是过去研究成果的总结。它的出版有助于人们认识量子力学和微观粒子的真正本质,推动量子力学向前发展;也能解决量子力学中争论了一个多世纪的一些基本问题;并有助于改变人们研究微观问题的方法,加深人们对微观粒子本质的认识。

本书的最大特点是知识的创新性、新颖性和系统性。其中大多数是作者的原创性研究成果,但也结合了当前各国科学家在这方面研究的最新成果。这是目前国际和国内第一本、也是目前唯一一本关于非线性量子力学的专著和教科书。

本书研究了在非线性系统中微观粒子运动特性和规律的科学。全书共 8 章,第 1 章在肯定量子力学的成绩和取得的成功基础上,介绍了它存在的一些基本问题,阐明了建立非线性量子力学的必要性。第 2 章依据宏观量子效应的实验结果和本质分析,用相应的低温超导和超流理论研究了其中的微观粒子的运动规律和特性,阐明了建立非线性量子力学的实验和理论基础。第 3 章详细描述了非线性量子力学的原理和几个基本理论,包括了态的非线性叠加原理、表象变换的傅里叶关系、微扰理论、量子化理论、定态与本征值理论和相对论性理论等,并阐明了非线性量子力学是线性量子力学发展的必然结果,是一个正确的和普适的新理论。第 4 章和第 5 章详

细描述了在非线性量子力学中微观粒子所具有的波-粒二象性及粒子的碰撞、散射和相互作用的特性。第 6 章阐明了通过自相互作用、自聚焦、自陷、自凝聚等机制产生的非线性相互作用的特点及其实验证实。第 7 章详细叙述了求解非线性量子力学问题的方法。第 8 章探讨了在有机分子、蛋白质大分子和氢键物理系统等实例中的激子、质子、声子等微观粒子的非线性量子力学特征及求解方法。整本书形成了一个完整的非线性量子力学理论体系。

本书可作为物理学、化学、生物物理学、电子学和天体以及地球物理等专业高年级本科生和研究生的教材，也可作为相关科研人员的参考书。为方便教学，本书为任课教师提供免费电子教学课件，可登录华信教育资源网(<http://www.huaxin.edu.cn>)注册下载或发送电子邮件至 duandh@phei.com.cn 索取，欢迎任课教师及时反馈授课心得和建议。

由于本书是国际和国内第一本非线性量子力学方面的书籍，加之作者所知有限，书中难免存在不妥之处。希望读者批评、指正，使之有所改进，对此表示真诚的感谢！作者邮箱：pangxf2006@yahoo.com.cn。

目 录

第 1 章 非线性量子力学建立的必要性	1
1.1 量子力学的基本假设及其应用	1
1.1.1 量子力学的基本假设和成就	1
1.1.2 量子力学的应用及其成就	6
1.2 量子力学存在的困难及争论的问题	7
1.2.1 量子力学存在的困难和问题	7
1.2.2 对量子力学引发的一些争论	9
1.3 发展非线性理论是解决量子力学问题的必由之路	11
1.3.1 量子力学问题的根源和发展方向	11
1.3.2 德布罗意的非线性波动理论的思想	12
1.3.3 非线性科学和孤子理论发展的启示	13
习题	14
第 2 章 非线性量子力学建立的基础	15
2.1 宏观量子效应及其特点	15
2.1.1 超导体的宏观量子效应	15
2.1.2 超流液氦中的宏观量子效应	18
2.1.3 量子霍耳效应	19
2.1.4 其他宏观量子效应	20
2.2 宏观量子现象是一种非线性量子效应	22
2.2.1 宏观量子效应的本质	22
2.2.2 宏观量子现象的非线性作用方程	23
2.2.3 宏观量子状态是一种相干态	25
2.2.4 宏观量子效应是不同于微观量子效应的新物理效应	26
2.3 超导宏观量子状态中准粒子的非线性运动特性	27
2.3.1 粒子的状态和动力学方程	27
2.3.2 无外场时准粒子的运动特点	28
2.3.3 在有电磁场存在时粒子运动及超导体的涡旋结构	30

2.3.4	超导电子在时-空中的动力学特性	31
2.4	量子超流液氦的非线性动力学特性与宏观量子效应	35
2.4.1	动力学方程及其孤子解	35
2.4.2	非线性相互作用将氦原子局域为孤子的特点	36
2.4.3	在超流液氦量子体系中观察到的宏观量子效应的解释及环流量子化	37
	习题	38
第 3 章	非线性量子力学的基本原理和理论	40
3.1	宏观量子效应的启示	40
3.2	非线性量子力学的基本原理	42
3.2.1	非线性量子力学的基本原理	42
3.2.2	非线性量子力学基本原理的特点	42
3.3	非线性量子力学的叠加原理和傅里叶变换	45
3.3.1	非线性叠加原理和相应的贝克隆变换	46
3.3.2	SG 方程的 $\phi_{\text{en}} = \sin \phi$ 的非线性叠加原理	49
3.3.3	非线性傅里叶变换和表象变换关系	49
3.4	非线性量子力学中的量子化方法	51
3.4.1	直接量子化的方法	51
3.4.2	对波函数进行量子化	53
3.5	非线性微扰理论	55
3.5.1	线性微扰法	56
3.5.2	结构微扰法	57
3.6	非线性 Schrödinger 方程的本征值问题	58
3.6.1	非线性 Schrödinger 方程的本征值问题	58
3.6.2	非线性 Schrödinger 方程的本征值的特点	61
3.7	非线性系统的哈密顿量的本征能谱	66
3.7.1	单粒子的本征能量的求法	66
3.7.2	分立的多模或多自由度或多粒子系统的本征能量的求法	66
3.8	相对性非线性量子力学理论	68
3.8.1	基本动力学方程和相应的局域态	68
3.8.2	相对论动力学方程与非相对论动力学方程之间的自洽性	70
3.8.3	相对论理论具有的洛伦兹协变性	72
3.8.4	在相对论情况下微观粒子的运动和相互作用特性	73
3.8.5	非线性 Daric 方程	77

3.9	非线性量子力学是量子力学发展的必然结果	78
3.9.1	量子力学中的微观粒子的非局域性	78
3.9.2	非线性作用使粒子局域	79
3.10	非线性量子力学的正确性和普适性	82
3.10.1	局域的粒子处于能量最低态	83
3.10.2	局域粒子表现出来的波-粒二象性	84
3.10.3	粒子的局域性是粒子与另一粒子或背景场之间的非线性相互作用的结果	85
3.10.4	线性量子力学是一个近似理论	88
	习题	90
第 4 章	在非线量子力学系统中微观粒子的特性	91
4.1	微观粒子具有的能量、动量和质量守恒定律	91
4.1.1	微观粒子的质量、能量和动量	91
4.1.2	微观粒子具有的能量、动量和质量守恒定律	92
4.1.3	非线性 Schrödinger 方程相关的 Noether 原理决定的一些守恒定律	93
4.2	微观粒子的位置及其运动规律	96
4.2.1	微观粒子的质心位置与速度	96
4.2.2	微观粒子按经典规律运动	97
4.2.3	运动方程的应用	98
4.3	非线性量子力学中的微观粒子的拉格朗日方程和哈密顿方程	99
4.3.1	微观粒子的拉格朗日方程	99
4.3.2	微观粒子的哈密顿方程	100
4.4	在非线系统中微观粒子的稳定性	102
4.4.1	在受力场中的粒子的稳定性论证方法	103
4.4.2	稳定性的变分法证明	104
4.5	微观粒子在界面上的反射和传播特性	105
4.6	非线性微观粒子的 Fraunhofer 衍射效应	108
4.7	在非线量子力学中的测不准关系	113
4.7.1	在线量子力学中的测不准关系	113
4.7.2	在非线量子力学中微观粒子的测不准关系	114
4.7.3	在相干态和压缩态中的微观粒子的测不准关系	115
4.7.4	在非线量子力学的量子涨落效应的特点	118
4.7.5	由量子涨落效应所引起的微观粒子状态的不确定性	118
	习题	121

第 5 章 非线性微观粒子的碰撞和相互作用特性..... 123

5.1 微观粒子相互碰撞的特性 123

5.1.1 具有吸引非线性相互作用的 ($b>0$) 的非线性 Schrödinger 方程的
微观粒子的碰撞特征..... 123

5.1.2 在碰撞过程中的特性 125

5.2 微观粒子相互碰撞的基本规则及机理..... 128

5.2.1 具有排斥非线性相互作用 ($b<0$) 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2)
描述的两粒子的碰撞特性 128

5.2.2 碰撞的机理模型和结果..... 130

5.3 多粒子的碰撞效应及其稳定性..... 134

5.4 量子化的微观粒子的碰撞特性..... 138

5.5 杂质对微观粒子的散射效应 143

5.6 在电磁场作用下的微观粒子的特性..... 147

5.7 微观粒子在空间周期性外势场中的运动特性 151

习题..... 156

第 6 章 非线性相互作用和微观粒子的局域..... 157

6.1 色散效应和非线性相互作用 157

6.1.1 色散效应..... 157

6.1.2 非线性相互作用的效应..... 159

6.2 粒子的自相互作用和固有的非线性特性 161

6.3 由无惯性自相互作用导致的微观粒子的自局域 166

6.4 介质场的非线性特征和波的自聚性机制 168

6.4.1 介质的色散和非线性特征 168

6.4.2 非线性 Schrödinger 方程的建立 169

6.4.3 微观粒子局域的自聚焦机制 170

6.5 粒子局域的自陷机制 171

6.5.1 有机分子中的激子激发..... 171

6.5.2 非线性激发的产生 173

6.6 微观粒子的局域与初始条件 175

6.6.1 有初始条件时的散射数据 175

6.6.2 有初始条件时形成的局域状态..... 176

6.7 粒子局域的实验证实 178

6.7.1 在水中形成的非传播孤立波特性和 178

6.7.2 在光纤中传播的光的自聚焦现象	182
习题	184
第 7 章 求解非线性量子力学问题的方法	185
7.1 函数和变量变换方法	185
7.1.1 函数互换法	186
7.1.2 变量变换和特征线	186
7.1.3 另外一些变换	186
7.1.4 自相似变换法	186
7.1.5 Galilei 变换	187
7.2 行波法	188
7.2.1 非线性 Schrödinger 方程的行波法	188
7.2.2 Sine-Gordon 方程的行波法	189
7.2.3 ϕ^4 场方程的行波解	191
7.3 反散射法	191
7.3.1 非线性 Schrödinger 方程的反射方法	192
7.3.2 具有初始条件的反散射方法	195
7.3.3 具有初始值的非线性 Schrödinger 方程的求解	196
7.4 基于反散射变换的微扰方法	199
7.4.1 基本的求解办法	199
7.4.2 具体的求解过程	200
7.5 微扰求解法	202
7.6 D 标符和 Hirota 解法	206
7.6.1 D 算法及其特点	206
7.6.2 非线性 Schrödinger 方程的 D 算符解	207
7.6.3 三维非线性 Schrödinger 方程的解	208
7.7 Bäcklund 变换法	209
7.7.1 自动 Bäcklund 变换法	209
7.7.2 Hirota Bäcklund 变换法	212
7.8 分离变量法	213
7.9 在多粒子系统中微观粒子特性的解法	216
7.9.1 多粒子系统中的非线性激发及其特点	216
7.9.2 动力学方程的解及其特性	218
7.10 用降低维度的方法求高维非线性方程的解	221

7.10.1	二维非线性 Schrödinger 方程的降维求解方法	222
7.10.2	具体情况的讨论	223
7.11	在扰动作用下高维 Schrödinger 方程的解法	225
7.11.1	Gaididei 等的求解方法	225
7.11.2	Desyatnikov 等人的求解方法	229
习题		232
第 8 章	非线性量子力学理论的应用	233
8.1	在有机分子中激子的非线性量子力学特性	233
8.1.1	有机分子的乙酰苯胺的分子结构及其产生的激子的特点	233
8.1.2	有机分子中的非线性激发满足非线性 Schrödinger 方程	234
8.2	蛋白质分子中激子的非线性特性	239
8.2.1	在蛋白质分子中的非线性激发的模型	239
8.2.2	系统中的非线性激发应当用非线性 Schrödinger 方程描述	242
8.2.3	非线性粒子态的特性	243
8.2.4	系统中粒子的非线性激发对背景场产生的反效应	245
8.3	在生理温度时蛋白质中的激子-孤子态的热稳定性	247
8.3.1	非线性系统的正则量子化方案	247
8.3.2	在生理温度时非线性粒子的寿命计算及其随温度变化的特点	250
8.4	结构的无序和介质的温度及阻尼特性对激子的非线性激发运动的影响	256
8.4.1	数值模拟的基本方法	256
8.4.2	系统的结构无序对孤子态的影响	257
8.4.3	系统的温度和介质的阻尼特性对非线性粒子的影响	260
8.5	在蛋白质分子中非线性激发的本征能谱计算	263
8.6	在分子晶体和蛋白质中激子局域的孤子态特性的实验证实	270
8.6.1	在乙酰苯胺中的实验数据	270
8.6.2	蛋白质的红外吸收和 Raman 散射实验结果	273
8.6.3	E.col(大肠杆菌)的红外吸收谱线	275
8.6.4	ACN 和蛋白质分子的比热容	277
8.7	氢键系统中质子的非线性激发	278
8.7.1	氢键结构和氢键系统中的质子运动	278
8.7.2	氢键系统中质子的传递理论	281
8.8	质子的非线性激发的运动特点	287
8.8.1	系统中的扭结对孤子态的产生	287

8.8.2	离子缺陷运动的特点	289
8.8.3	键缺陷运动的特点	290
8.8.4	质子的孤子态的特点	291
8.9	系统特性的变化和环境因素对质子的孤子态的影响	293
8.9.1	重离子的非简谐运动	293
8.9.2	系统中的杂质的影响	295
8.9.3	系统中的迁移偶极矩对质子的孤子态的影响	297
8.10	氢键系统中质子的孤子态的实验证实	298
8.10.1	外电场对质子孤子的影响	298
8.10.2	在氢键系统中质子的迁移率和电导率	302
8.10.3	质子的孤子态的迁移率随系统的温度的变化特性	303
8.10.4	质子的孤子态的传导引起的比热容和临界温度	305
	习题	308
	主要参考文献	309

第 1 章 非线性量子力学建立的必要性

本章介绍了量子力学的基本假设。在肯定量子力学正确性的基础上，给出了它所存在的问题和困难，以及一些引起长期争论的问题。并且，指出了量子力学的发展方向和建立非线性量子力学的必要性。

1.1 量子力学的基本假设及其应用

组成宏观物质的微观粒子其本质不同于宏观粒子本身，它的质量小(大约为 $10^{-31} \sim 10^{-25} \text{ kg}$)，尺度也小(大约 0.1 nm 左右)，运动速度快，所以人们认为它具有波动性。革末和戴维孙等人的电子晶体衍射及杨氏双缝衍射实验证明了这一点。德布罗意等人又进一步确定了微观粒子具有波-粒二象性，因此，描述微观粒子的运动特点和规律的理论应不同于宏观粒子的经典力学。20 世纪初期，玻尔、德布罗意、薛定谔和海森堡以及玻恩等人建立了描述微观粒子的量子力学，并且是基于下面陈述的几个基本假设的基础上建立起来的。

1.1.1 量子力学的基本假设和成就

很清楚，建立的量子力学需要解决如何描述微观粒子的运动规律和特点的问题。这就必然涉及到如何标志和描述微观粒子本身的状态，和以什么样的物理量来确定它的特性，以及在粒子的状态变化时遵守什么样的动力学方程等问题。为此，对于量子力学做了以下几个基本假设。

(1) 微观粒子的状态用坐标空间的一个波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 或用希尔伯特空间中的一个矢量 $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ 来表示。如果它是归一化的，即 $\langle\psi(\vec{r}, t)|\psi(\vec{r}, t)\rangle = 1$ ，则称之为归一化波函数或波矢量。这个波函数表征了微观粒子具有的波动性。

(2) 由于粒子的状态已用波函数表示，则通常在经典力学中用来表征粒子特性的力学量如坐标、动量和能量仅用相应的算符来表示。对于一些可观察的力学量，则用特定的厄米算符来标志。这意味着在量子力学中有不同类型的算符。只有当这些算符作用在表征粒子状态的波函数或波矢量上时，才或许能得到这些力学量所具有的可能值，显示出它真正的物理意义。

(3) 一个力学量的算符 \hat{A} 在任意一个态 $|\psi\rangle$ 中仅能得到一些平均值。将其定义为

$$\langle\hat{A}\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle \quad (1.1)$$

如果 $|\psi\rangle$ 是归一化的, 则 $\langle\hat{A}\rangle=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$ 。由此求得的平均值不是此力学量的确定值, 而仅是一些可能值。要想得到一个确定值 A , 则必须寻找一个新的本征态 $|\psi_L\rangle$ 。所谓一个算符 \hat{A} 的本征态, 就是此态必须满足本征方程

$$\hat{A}|\psi_L\rangle=A|\psi_L\rangle \quad (1.2)$$

式中, A 就称为算符 \hat{A} 的本征值。根据式(1.2), 有 $\langle\psi_L|\hat{A}|\psi_L\rangle=A=A\langle\psi_L|\psi_L\rangle$ (这里认为 $|\psi_L\rangle$ 是归一化的)。于是, 此力学量的本征值就是确定的。从上面可以得知, 力学量在任意态 $|\psi\rangle$ 上的可能值的数目一定等于在本征态上的本征值的个数, 它们有一一对应的关系存在。

可观察的力学量所对应的厄米算符的本征值一定是实数, 并构成了希尔伯特空间中的基矢量。对应于不同本征值的本征矢量是相互正交的, 而可对易的厄米算符有共同的本征矢量, 它们可构成一个正交完备集 $|\psi_L\rangle$ 或 ψ_L , 则其他的波函数或矢量 $\psi(\vec{r}, t)$ 都可以向它展开, 即

$$\psi(\vec{r}, t)=\sum_L C(L)\psi_L(\vec{r}, t) \quad \text{或} \quad |\psi(\vec{r}, t)\rangle=\sum_L \langle\psi_L|\psi\rangle|\psi_L\rangle \quad (1.3)$$

其展开系数 $C(L)=\langle\psi_L|\psi\rangle$ 就是 L 表象中的波函数。于是式(1.3)是状态波函数或波矢量的表象变化关系。有时又称它为谱的分解, 其实质就是把系统 $\psi(\vec{r}, t)$ 向亚系统的分解。对于连续性的 L 值, 则式(1.3)可写成积分形式:

$$\Psi(\vec{r}, t)=\int dL C(L)\psi_L(\vec{r}, t)$$

从式(1.3)也可确定在状态 $\psi(\vec{r}, t)$ 中测得力学量 L 等于某一值 L' 的概率应为 $C(L')=|\langle\psi_{L'}|\psi\rangle|^2$ 。对于连续谱的情况, 它为 $|\langle\psi_{L'}|\psi\rangle|^2 dL$ 。在这种测量中, 可以认为此时系统处于相应的本征态上。这就是量子力学对测量所做的一个重要假设。

(4) 对于一个微观系统, 其粒子的状态随时间的变化满足其薛定谔方程, 即

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle=\hat{H}|\psi\rangle \quad i=\sqrt{-1} \quad (1.4)$$

式中, $\hat{H}(\vec{r}, t)$ 称为系统的哈密顿算符或能量算符, 它可表示为 $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$, 其中 $\hat{T}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ 称为粒子的动能算符, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ 是它的势能算符; $\hbar=\frac{h}{2\pi}$, 其中 h 是普朗克常数。在坐标表象中, $\hat{V}(\vec{r}, t)$ 仅是 \vec{r} 和 t 的函数。从式(1.4)可以看出, 它是一个 $\psi(\vec{r}, t)$ 的线性方程, 其系统的哈密顿算符仅随外势场而变化, 与粒子的状态或状态波函数无关。后者也是量子力学所做的一个基本假设, 同时, 式(1.4)也决定了微观粒子的基本属性, 表明粒子在任何时刻的状态就由体系的哈密顿算符决定。如果一

个系统在开始时刻的态矢量是 $\psi(t_0)$ ，则在 t 时刻的状态便可由一个么正运动算符 $\hat{U}(t, t_0)$ 联系起来，即

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad (1.5)$$

式中， $U(t, t_0)$ 满足 $\hat{U}(t_0, t_0) = 1$ ， $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1$ 。若令 $\hat{U}(t, 0) = \hat{U}(t)$ ，则由式 (1.4) 可得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = \hat{H} \hat{U}(t) \quad (1.6)$$

当 \hat{H} 不含时间时， $\hat{U}(t) = e^{-i(\hat{H}/\hbar)t}$ 。如果 \hat{H} 含时间，则有

$$\hat{U}(t) = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_0^t dt_1 \hat{H}(t_1) \int_0^{t_1} dt_2 \hat{H}(t_2) + \dots \quad (1.7)$$

这反映了微观粒子运动规律的因果关系。

以上就是量子力学对微观粒子的状态和力学量所做的一些假设。下面谈论一下它们遵循的几个原理。

(5) 状态波函数或波矢量的叠加原理。如果微观粒子的状态波矢量 $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ 用另一矢量 $\lambda|\psi(\vec{r}, t)\rangle$ 代替 (这里 λ 是常数)，则由后者描述的是与前者一致的同一粒子的状态。如果 $\psi_1(\vec{r}, t)$ 和 $\psi_2(\vec{r}, t)$ 是一个粒子的两个不同状态，则它们的线性迭代状态

$$\psi(\vec{r}, t) = C_1 \psi_1(\vec{r}, t) + C_2 \psi_2(\vec{r}, t) \quad (1.8)$$

仍是描述该粒子的一个状态。这表明微观粒子的不同状态的线性叠加态仍是该粒子所处的一个态，这称为粒子状态的线性叠加原理。它是相关于量子力学中的算符是线性算符，而状态波矢量是线性希尔伯特空间中的一个矢量这一理论的必然结果。因此，它和式 (1.4) 至式 (1.5) 的线性波动方程结合在一起便决定了量子力学理论的线性特性。为此，这里确切地称之为线性量子力学。

(6) 对应原理。如果经典力学量 A 和 B 满足泊松括号：

$$\{A, B\} = \sum_n \left(\frac{\partial A}{\partial p_n} \frac{\partial B}{\partial q_n} - \frac{\partial A}{\partial q_n} \frac{\partial B}{\partial p_n} \right)$$

式中， q_n 和 p_n 可以是经典系统的广义坐标和广义动量，则在量子力学中，相应的算符 \hat{A} 和 \hat{B} 满足下列对应关系：

$$[\hat{A}, \hat{B}] = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) = -i\hbar \{A, B\} \quad i = \sqrt{-1} \quad (1.9)$$

若 \hat{A} 和 \hat{B} 分别用坐标符 \hat{q}_n 和动量算符 \hat{p}_n 代替，则有

$$[\hat{p}_n, \hat{q}_m] = -i\hbar \delta_{nm} \quad (1.10)$$

等关系成立。这反映了微观系统的物理量所取的值是量子化的这一事实。这也是“量子力学”得名的缘由之一。由这一基本原理可得到海森堡测不准关系：

$$\overline{(\Delta\hat{A})^2} \overline{(\Delta\hat{B})^2} \geq |\hat{C}|^2/4 \quad \text{或} \quad |\Delta\hat{x}| |\Delta\hat{p}| \geq \hbar/2 \quad (1.11)$$

这里 $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ 。由此可以得出，坐标与动量之间的测不准关系不是测量带来的结果，而是量子力学本身或微观粒子仅具有波动性的一个必然结果。

(7) 全同性原理。任何一对同样粒子 (k, j) 对换不会出现新的物理态，即它满足 $\hat{P}_{kj}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$ ， $\lambda = \pm 1$ 的关系，这称为全同性原理，这里 \hat{P}_{kj} 为交换算符。因此，全同性粒子系统的波函数只能有两种： $\psi = \psi_s$ 的对称态 ($\lambda = +1$) 和反对称态 $\psi = -\psi_a$ ($\lambda = -1$) 存在，并且这种性质是不随时间而改变的，仅由粒子的性质决定。如果粒子是玻色子，则是完全对称态；如果是费米子，则是完全反对称态。

(8) 测量的假设。在一般情况下，量子力学未涉及这一问题。为了形成一个自封闭的力学系统，这里引入了这一假设。但测量是量子力学中十分麻烦的问题，对它的争论也很大。这里仅简单对它做一点阐述。按照通常的量子力学理论的表述：从式 (1.3) 可知，在对某一个量子力学体系做测量时，体系将跃迁到相应算符的本征态上，或者说由所谓的纯粹状态转化为混合状态或由纯粹系综转化为混合系统。具体来讲，如果人们对某一量子力学体系的物理量 \hat{L} 做测量后，此体系必定进入由该物理量相对应的厄米算符 \hat{L} 所决定的本征态之一上，这时的式 (1.2) 便要改写为 $\hat{L}\psi_n = L_n\psi_n$ 。这表明任意一个量子力学体系 ψ_s 在测量后应有由式 (1.3) 确定的 $\psi_s \rightarrow \psi_n$ 的变化，其变化的概率为 $|C_n|^2$ ，而 C_n 满足 $\psi_s = \sum_n C_n \psi_n$ ，这称为测量假说。

有些文献又称为投影假说，因为这种跃迁到本征态的过程，相当于在希尔伯特空间中的一种“投影”运算。这表明微观粒子体系在测量前和测量后的性质已有一个原则性的差别。在测量前，波函数 ψ_s 可展开为算符 L 的本征波函数的线性叠加态，即式 (1.3)，现写为

$$\psi_s = \sum_l C_l \psi_l \quad l = 1, 2, 3, \dots$$

此时不同本征态之间是“相关”的。但在测量后， ψ_s 进入相应的本征态 ψ_n 。这时，不同的本征态是“不相关的”。这意味着在进行具体计算中不能再计算它们的相干项。通常称具有相干性的物理状态为纯粹状态，而不相干的物理状态便称为混合状态。当然，如果测量时只对决定全部量子状态的量子数之一进行测量，那么测量后进入的状态仅是部分相干的。

但在实际的量子力学计算中经常遇到的一个问题是，所研究的对象究竟是处在相干的状态，还是处在不相干的状态。例如在探讨级联跃迁过程时，常常要对中间态求和。这就遇到一个是先求和后平方还是先平方后求和的问题。或者可以这样讲，未测量过的中间态是相干的，测量过后就可能不相干的等问题。

有些人认为：这一假说可以从线性量子力学的其他基本原理“推导”出来。就此，有许多量子力学的奠基人对它做过研究，也有一些量子力学的教科书“给出”过这种推导。但实际上这是不可能的，它必须独立地引入到线性量子力学体系中。因此，线性量子力学如果缺少了这个假说，则在逻辑上就很难形成自相封闭的系统。例如，在双缝衍射的实验中就会得到一系列相互矛盾的结果。正如所知，用在孔隙后面的衍射花样是由粒子所服从的薛定谔方程式以及相应初始条件和边界条件所决定的。则障碍物上的单缝孔隙决定了孔隙后的照相底片拍摄的是单缝衍射花样；而障碍物上的双缝决定了图样是双缝衍射的花样。显然，后者不是两个单缝衍射花样的简单叠加，其原因是这里存在“干涉”的波动。如果人们在双缝后面的某一孔隙邻近对飞行中的粒子进行测量(如放置一云雾室)，会使我们知道某一粒子已经飞过这一单缝，而后来的粒子运动将以此测量结果作为初始条件，并以满足此边界条件的薛定谔方程式进行演化。于是我们得到的是单缝衍射的花样。但如果在两个孔隙后面都分别放一个云雾室，则会绘出一个衍射花样，并且它们是两个单缝衍射的叠加。然而，若在线性量子力学理论中不引进测量假说，即认为测量将不影响粒子的状态，那么量子力学将产生一个矛盾。即它将给出两个极不相同的预言，一个是有利于干涉项在内的双缝衍射花样，另一个是两个单缝衍射花样的算术叠加。

为了消除理论上的这一矛盾，在线性量子力学中宁可引进测量假说，宁可粒子波函数在经过测量后进入本征态，即发生波包的收缩现象。

但量子力学中的概率诠释指的是 $|\psi|^2$ ，而波包的收缩却是波函数 ψ 。尽管测量后人们根据新的知识做出了新的预测，但是，只根据统计知识的不完备性并不能解释为什么测量后的双缝衍射花样要变成两个单缝衍射的花样的叠加。如果波包的收缩是由于获得了新的“知识”，那为什么干涉项竟然跟随这一知识而消失了呢。为了解决这个问题，玻尔提出了仪器和微观粒子之间存在着不可控制的相互作用的假说，认为在仪器和粒子相互作用时，会“不可控制”地在相应本征态上产生某个任意的相角，正是它的存在导致干涉项的消失。例如，对于双缝衍射的现象来讲，在缝隙A和B后的波函数可表示为两项的叠加，即

$$\psi(x) = \psi_A(X) + \psi_B(X)$$

如果只有A和B，那么某粒子到达坐标X的概率将分别是 $P_A(X) = |\psi_A(X)|^2$ 和

$P_B(X) = |\psi_B(X)|^2$ 。如果说双缝 A 和 B 同时存在, 则有 $P(X) = |\psi_A(X) + \psi_B(X)|^2 = P_A(X) + P_B(X) + \psi_A^*(X)\psi_B(X) + \psi_B^*(X)\psi_A(X)$, 式中后面的两项便是标准的干涉项。玻尔认为, 在测量后的波函数将引入一个任意的相位 θ_A 和 θ_B , 亦即有 $\psi(X) = \psi_A(X)e^{i\theta_A} + \psi_B(X)e^{i\theta_B}$ 。这时, 在坐标 x 处的概率就成为

$$P(X) = |\psi_A|^2 + |\psi_B|^2 + \psi_A^*\psi_B \exp[i(\theta_B - \theta_A)] + \psi_B^*\psi_A \exp[i(\theta_A - \theta_B)]$$

式中, 后两项仍是干涉项, 但这时由于新引入的相角是“无规”和“不可控制”的, 则会使得这一干涉项总的效应相互抵消, 从而等于零。于是, 在上述的斯忒恩和盖拉赫实验中, 在测量后的波包(例如对粒子在空间的位置进行测量)也会由于引入某个“任意”的或“随机”的相角, 而使干涉项消失。

但又如何解释仪器和粒子之间的不可控制的相互作用? 有些人企图用测不准关系来加以解释。他们认为微观粒子之间之所以测不准是由于在仪器和粒子间存在着某种“不可控制”的作用量子, 并将“不可控制”的作用量子 and “不可控制”的“任意”相角相提并论, 或认为这一“不可控制”的相角是由测不准关系导致的结果。但由测不准关系导不出“不可控制”的“任意”相角的结果。相反, 如果在测量后导致某种任意的相角, 还要“破坏”已知的测不准关系。例如, 某个局限在某一空间范围内的波包可以展开为一系列平面波的叠加, 即

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int \Psi(p) e^{ipx/\hbar} dp$$

如果对这一系统的动量进行测量, 将会产生一系列相互无关的, 无干涉作用的平面波, 从而会导致波包的解体。由此看来, 要弄清量子力学中的测量问题是十分困难的, 还需要深入研究。

1.1.2 量子力学的应用及其成就

在以上介绍的几个基本假设(或公理)的基础上, 海森堡、薛定谔、玻恩和狄拉克等人建立起反映微观粒子运动规律和特性的量子力学理论。由这一理论可知, 一旦知道微观粒子所处的外势场的具体表达式和粒子初始时刻、初始位置的状况, 便可用薛定谔方程(在相对论下, 用狄拉克方程和克莱因-高登方程)来确定粒子在任何时刻、任何地点的状况和特点等。于是便把一个复杂的微观运动变成求线性偏微分方程解的问题, 这是科学的一大进步。人们以它为指导, 用来确定处于稳定状态的电子、原子、分子或大分子及至固体等一切物体的能量状态、能级分布和能带结构, 并以此来确定物质的力学、电学和光学等特征。也可以用来研究微观粒子在外电磁场和光、声、热等场中的性质与特征。因此, 量子力学在一定程度上确实反映了组成物体的微观粒子的运动规律, 从而使它成为现代物理学的理论基础和支柱。它在

研究微观粒子如电子、声子、光子、激子、原子、分子和原子核以及基本粒子等的运动特征和由这些准粒子运动所决定的物质特性上取得了很大成就。其最大的成功是运用它于氢原子、氢分子、氦原子等时，计算出了它们的能级、光谱和其他性质，从光谱所得的实验值与由理论所得的结果完全一致。这表明了量子力学的成功。在计算其他的许多原子、分子和一些化合物的光谱、原子或物质的磁性、半导体特征和光学特征上都得出了与实验基本吻合的结果。同时，量子力学理论已深入到物理学、化学、宇宙学和生物学等各个领域，得到了极其广泛的应用。当应用于光学、分子、原子核、基本粒子、凝聚态物理、生物大分子和有机高分子等中时，分别产生了量子电动力学、量子光学、量子场论、量子统计物理学、量子固体理论、量子化学、量子生物学和量子宇宙学等新兴学科。实验已证明，在用量子电动力学理论计算氢原子的兰姆移动、氢原子的超精细结构和电子的反常磁矩等值时与实验测得的值符合，从而使量子电动力学称为目前物理学中成功的理论之一。因此，量子力学成为当代科学的基础，其成就是巨大的，应用是广泛的。

1.2 量子力学存在的困难及争论的问题

1.2.1 量子力学存在的困难和问题

量子力学的成功是大家公认的，这是应当肯定的。但是，量子力学理论和其他理论一样，由于时代、科学水平和知识及技术条件的限制，不免存在一些局限性和困难。它的成功也不能掩盖其理论自身存在的困难，并随着科学技术的发展，这些问题变得更加突出，致使人们怀疑如此简单的科学理论就能完全概括错综复杂的微观客体的不同特点吗？可见，量子力学需要发展。如果深入研究量子力学，我们会发现在理论自身的框架上、在描述微观客体的性质上和在应用上等三个方面它存在不同程度的局限性和困难。

1. 理论本身的困难

从上述的基本假设可知，量子力学是描述单个粒子的动力学状态和特点的理论，但它又采用平均值来确定力学量所取的可能值。众所周知，平均值是描述大量粒子组成的系统或系综的统计物理学中的概念。于是，这一基本假设就模糊了物理概念，从而使人们琢磨不定量子力学到底是描述单个粒子的动力学特点还是描述大量粒子的统计系统特征。

另外，在量子力学中，状态波函数的平方 $\langle \psi | \psi \rangle$ 或 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 表示粒子在 \vec{r} 位置和 t 时出现的概率，力学量的可能值或本征值则由该点和该时刻的瞬时值与这个概率的乘积的积分或求和来决定。在这种情况下，粒子的确定性不能得到确认，代之以

上的是或然率和概率。这种不确定性的理论难以使人们相信量子力学是描述粒子物质客体运动的正确理论。

其次，量子力学在描述具有波-粒二象性的微观粒子的粒子性时是用了波函数绝对值的平方 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 来标志粒子出现于空间某点的概率，则在粒子存在的空间中的每一点，这个 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ 值都不会等于零，即每一点都存在粒子。这意味着粒子会充满整个空间。于是就会有 1/2 个粒子、1/3 个粒子或更小的粒子存在，这又如何使人们能够去认识一个微观粒子呢？

最后，按态的叠加原理可知，粒子的不同状态的叠加状态仍然是描述相同粒子状态的波函数。而这种对波动的认识总是与真实波动的概念格格不入。同时，由基本假设推出的测不准关系式(1.11)总是使人难以理解。对于一个真实存在的粒子，是什么原因会造成人们对粒子的位置进行精确测定时，就必然会导致对粒子的动量值测得极不准确呢？这种状态在自然界难以用一个具体的实例来直观地进行验证。

这些使人困惑的问题显示了量子力学理论本身的困难，于是使人很难相信量子力学是一个最终正确的理论。

2. 量子力学描述微观粒子性质的困难

从基本假设式(1.4)或线性薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \psi(\vec{r}, t) \quad (1.12)$$

知道此方程是 $\psi(\vec{r}, t)$ 的线性波动方程，其解是表示一个波的运动状态。例如，当 $V(\vec{r}, t) = 0$ 时，它为一个平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = A \exp[i(\vec{p} \cdot \vec{r} - Et)/\hbar] \quad (1.13)$$

其本征能量 E 为

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad -\infty < p_x, p_y, p_z < \infty$$

若把粒子关在一个箱子里，它变成一个驻波。如果 $V(\vec{r}, t)$ 是一个周期场，它的解是一个布洛赫波。若处在一个与时间无关的保守场中，它可以是由贝塞尔函数、汗克函数等描述的波动。这些都表明不论势场 $V(\vec{r}, t)$ 为何种形式，微观粒子的状态都是一个波动，不可能局域，而会色散。由此可得出一个结论，由线性薛定谔方程式(1.12)或由量子力学描述的微观粒子是一个波动，它总是弥散于所在的整个空间，于是微观粒子不具有颗粒性。这与由德布罗意关系以及革末与戴维孙等的单缝和双缝衍射实验确定的波-粒二象性不相容。为弥补量子力学的这一不足，波恩才引入波函数的统计解释，即前面讲的波函数的绝对值的平方来表示粒子出现于某地的概率。

但这又导致量子力学是动力学理论还是统计系综理论的评论。总之，量子力学中存在一些不能“自圆其说”的问题。

3. 在应用上显示出来的不足

在量子力学应用的一个世纪中，能够精确求解的仅有氢原子、氢分子和氦原子等几个最简单的物理系统。当它运用到其他任何物理系统，例如多体多粒子系统和非线性系统就没有这么顺利了，要给出该系统的一个正确的线性薛定谔方程非常困难。此时不得不做许多简化和假设，忽略很多客观存在的相互作用和物质的影响，或者采用各种不同的近似方法。最常用的有平均场近似、自由电子近似、准自由电子近似、紧束缚近似和哈斯-福克近似，等等。做这些近似的目的就是把一种实际存在的、复杂的非线性相互作用抹杀掉。根据情况不同人为地“编制”出不同类型的简单的线性相互作用，并强行将它纳入到外势场中，从而把一个复杂问题归到线性薛定谔方程框架内来处理。于是就把决定微观粒子本质的相互作用，如非线性作用抹杀和“编制”掉。因此，在这些系统中仍然用量子力学方法求得其解。显然，这不是对系统中各种微观粒子运动进行真实的描述。从这个意义上讲，量子力学要描述一个真实存在的物理系统是十分困难的，这就显露了它的局限性。从本质上讲，线性量子力学是一个近似理论，特别是在研究复杂系统和多体多粒子及非线性系统时显得“力不从心”。

另外，在一个多体粒子系统中，人们往往不是“平等”地看待体系中的各个成员或成分，而是把我们关注或研究的粒子与其他粒子或客体分隔开来，并将它们冻结，机械地分析它们之间的相互作用力，又用一个平均场、周期场和平均相互作用势等来表示。从而抹杀掉其他粒子或客体客观存在的运动，以及这种运动或自相互运动对研究粒子运动的影响。这后者刚好就是施加研究粒子上的，与粒子状态相关的非线性相互作用。从这个意义上讲，原有量子力学在研究方法上存在缺陷，缺乏对粒子运动本质的深入认识等问题。这些都是客观存在的事实，表明量子力学确实有许多不足和局限性。

1.2.2 对量子力学引发的一些争论

由于量子力学有以上的困难、不足及问题，必然招致对它的争论。这种争论是长期的和激烈的。其长期性和激烈程度是科学史上从未有过的，已持续了一个世纪，直到现在这种争论还在继续。不过，其近期的争论主要集中在量子力学能否应用于处理复杂、多变的非线性系统的问题。而早期的争论主要集中在量子力学是否能完备地描述微观粒子等问题上。其争论主要是在以波尔为首的哥本哈根学派和以爱因斯坦为首的学派之间进行，并持续了他们的一生。更奇怪的是这些争论至今未有一个正确结论。在此不想对这些争论做详细描述，仅简单论述争论的焦点和结果。

这个早期旷日持久的争论大致可分为三个阶段。第一阶段是 1924—1927 年量子力

学刚建立起来时。爱因斯坦从自己的基本哲学信念和所乞求的科学目标(对客观物理世界做严格的因果性描述)出发,对量子力学作为一种概率性表述强烈不满。1926年12月4日他给玻恩的一封信中写到:量子力学固然是堂皇的,可是有一种内在的声音告诉我们,它还不是那么真实的东西……我无论如何都相信上帝不是在掷骰子。第二阶段是1927—1930年,玻尔提出并协原理并且形成正统解释后,爱因斯坦极其不满,把批判的矛头对准测不准关系。在第五届(1927年)和第六届(1930年)索尔维国际物理会议上,爱因斯坦提出了一个理想实验(双缝衍射,光子箱),试图证明测不准关系与量子力学形成体系之间的内在矛盾,从而否定玻尔的并协原理,但每次都被玻尔的机敏分析所驳倒。从此之后,爱因斯坦承认了量子力学体系的逻辑一致性,把批判矛头转向到量子力学描述的完备性问题上。第三阶段从1930年开始直到爱因斯坦逝世。突出的问题表现在1935年爱因斯坦与玻道尔斯基和罗森提出的“EPR悖论(或佯谬)”与玻尔的答辩之中。何谓EPR佯谬呢?他们三人考虑由两个粒子组成的一个复合系统做反向飞行。如果这一对粒子系统的初始动量 $P=0$ (这并不会失去一般性),那么在两个粒子发生相互作用并分开后,按照动量守恒定律,必定有 $P_1=-P_2$,但并未确定 P_1 和 P_2 的方向及它们的绝对值。当人们用某一探测器测量了其中的粒子1,得到 $P_1=+a$ 以后,按照线性量子力学中的动量守恒定律,粒子也可以处在 $P_2=-a$ 的状态上。但在量子系统的测量中,存在有一个波包收缩的效应,则探测器将从粒子1的波包 $\psi_1(X_1)$ 中“挑选”出动量为 $P_1=a_1$ 的平面波。按照量子力学,这一“谱分解”的过程是仪器和波包间的某种“不可控制的相互作用”的结果。但在这种相互作用的影响下,便可能出现 $P_1=a$ 或 $P_1=b$,等等。令人惊讶的是在用探测器来测定时,如果探测出 $P_1=a$,那么就必然有 $P_2=-a$,即不论是否对粒子2的波包 $\psi_2(X_2)$ 进行测量,都应该有这样一个数值出现。这就是说,当人们对波包 $\psi_1(X_1)$ 进行测量并发生波包收缩后,描述粒子的波包 $\psi_2(X_2)$ 也必将会自动发生收缩。那么人们要问这一现象产生的机制是什么呢?它们是以瞬时(即以超光速)的间隔发生这样的现象,还是按照狭义相对论以光速来传播的呢?

为什么测量时所引起的波包的收缩却自动地保证着动量的守恒呢？通过其系统的论证，爱因斯坦等人得出量子力学的描述不是完备的，也不满足“定域性”的准则。玻尔进行了反驳，但他并没有真正反对爱因斯坦等人提出的“佯谬”，而只是回答说量子力学可能不一定满足定域性的原则。既然量子力学不完备，就意味着在它背后还可能有更深刻的隐变数存在，有人认为可用它来解释微观粒子的概率行为。在这种“隐变数”思想的启发下，1952 年玻姆提出了第一个量子系统的“隐变数理论”。他认为量子力学中的统计特征来源于亚量子力学级的涨落。如果能找到决定微观粒子的隐函数，就可以对单个粒子做出决定性的描述。至此以后，又有许多改进的理论，如机遇式和定域隐变数理论，把微观粒子的运动看成是一个稳定的马尔科夫过程或服从福克-普朗克方程的粒子，等等。但在 1966 年贝尔从玻姆的决定性的定域隐变数理论建立起了贝尔不等式，并企图根据实验检验这种理论与量子力学孰是孰非时，其大多数实验支持量子力学的统计预言，否定了定域的隐变数理论。

总结起来，玻尔派和爱因斯坦派之间的长时间争论主要集中在三个问题上。一是爱因斯坦坚持相信微观世界和客观世界一样，是不依赖于感觉主体而独立和客观存在的，并且这种客观存在的理论描述的原则是决定性的。二是爱因斯坦自始至终认为量子力学理论不是终极的和完备的理论，它同经典光学理论差不多，是一种统计性理论。即知道在 t 时刻和 \vec{r} 处的概率 $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ ，由统计法可以算出和实验结果可比较的可观察量的平均值。但对于单个基元过程还缺乏充分的描述。因此，

$\psi(\vec{r}, t)$ 未能穷尽人们对微观客体的认识。三是对于量子力学的物理解释和理论的完备性不满，他提出波函数 ψ 所描述的，无论如何不能是单个体系的状态。它涉及到多个体系，从统计力学的意义上来说就是一个系综。并认为测不准关系是由于 $\psi(\vec{r}, t)$ 对客

观的描述不完备性所致。因为一个完备性描述应该是一切可观察量都是确定的。此外，他对统计规律的概率解释也不接受，因为他无论如何都不相信电子具有“自由意志”。因此，爱因斯坦对线性量子力学理论基础的不满是针对它的陈述所做的物理解释上。他认为这是人们对微观客体认识不充分带来的结果。最后，量子力学的创始人之一的狄拉克对线性量子力学的完备性也持异议。他于 1975 年在澳大利亚所做的量子力学的发展的演讲会上指出，“关于现在的量子力学存在一些很大的困难。”

“正是由于这些困难，我认为量子力学的基础还没有正确建立起来……于是关于现在量子力学基础是正确的说法，我不能接受”。因此，正确认识量子力学，建立完备的微观粒子运动规律的理论是十分必要的。

1.3 发展非线性理论是解决量子力学问题的必由之路

1.3.1 量子力学问题的根源和发展方向

从以上的研究得知,量子力学存在不少的问题,需要完善和发展。从而使它能够完整地描述包括复杂的多体多粒子系统在内的各种不同物理系统中的微观粒子所具有的波-粒二象性及其运动规律,并对微观粒子的认识和人们对粒子概念的一般理解吻合起来。那么又如何发展和向什么方向发展量子力学呢?为了找到发展的方向,必须首先找到造成上述困难和问题的根源和本质。

从式(1.4)或式(1.12)的量子力学的基本方程知道,薛定谔方程是粒子状态波函数 $\psi(\vec{r},t)$ 的线性方程,再加上线性叠加原理,可确定量子力学是一个线性理论。详细剖析线性薛定谔方程式(1.12)和系统的哈密顿算符的表示式:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r},t) \quad (1.14)$$

由式(1.14)可知,微观粒子的性质主要由动能色散项决定,此项表示了粒子的固有特性,即粒子总是处于运动之中。在线性量子力学中,微观粒子便以波动的形式弥散于所在的空间中。这种弥散特性不可能被外势场 $V(\vec{r},t)$ 所抑制和阻止。这是因为外势场是外因,它与粒子的状态波矢无关,于是不能决定粒子的本质特性。这意味着在运动方程中不存在一种能真正阻止粒子弥散的作用力,则在量子力学中的微观粒子便始终以波的形式弥散于整个空间。无论采取什么方法,在量子力学的框架内都不可能使微观粒子局域,而仅能以波动形式运动。这永远也不能和人们理解的“粒子”概念相协调。从而成为此理论无法克服的弱点。这也就是量子力学中微观粒子的本质。于是,微观粒子的波动性(色散性)、概率表示及测不准关系等特点必然出现。显然,这些特点都是由量子力学理论自身性质带来的结果。那么,这个理论在哪些地方不够完善呢?又有哪一个原理与实际情况不符合呢?从以上研究可看出,问题出在系统的哈密顿算符或能量算符与粒子的状态无关和理论本身的线性上。这两条不太符合客观的物理系统。根据物理学知识,粒子的能量大小一般相关于粒子的状态,处在不同状态的粒子一定具有不同的能量。于是系统的哈密顿算符应当与粒子状态波函数相关的。有了这种相互作用,则就改变粒子的特性,并能阻止粒子的弥散特性,使粒子可能被局域。另外,按一般的知识,粒子的不同状态叠加起来不一定再能描述原来粒子的状态。这意味着线性薛定谔方程式(1.12)和线性叠加原理应当改进。在一般系统中,特别是在多体多粒子系统及其他复杂系统中,其非线性相互作用始终存在,而线性性仅是一种特殊情况。由此分析使我们认识到,

发展量子力学就是要突破它的线性性和哈密顿算符与粒子的状态波函数无关的这两条基本假设。并将粒子存在的非线性相互作用加入到系统的哈密顿算符中，建立起非线性哈密顿算符和非线性薛定谔方程，让其中与粒子特性相关的非线性相互作用去阻止和抑制由动能项带来的色散效应。于是微观粒子便可能局域，最终使它有可能变为具有波-粒二象性的粒子，而这可能就是量子力学的发展方向。

1.3.2 德布罗意的非线性波动理论的思想

回忆起来，发展非线性量子理论的思想不得不提起德布罗意的工作。早在 1926 年，德布罗意在他所著的书中就认为波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 应是物理空间中真实存在的场，粒子永远有确定的位置和动量。他假设 $\psi(\vec{r}, t)$ 应是描述粒子与场之间的一种本质的耦合，并依此来解释电子的干涉和衍射现象。1927 年 5 月他在 J. de Physique 上发表的“波动力学与物质和辐射的原子结构”一文中提出了“双重解理论”。认为量子力学方程允许有一类具有统计意义的连续解 $\psi = R \exp(i\theta)$ ，它是一个薛定谔波，仅表示概率意义，可归一化，从而排除它是表示物理的波动。另一类是具有奇点的 u 波，它具有定域的意义，并由此确定了它的粒子特性。他把单色平面波公式加以推广，并用引导公式来规定粒子接受波的传播的引导规律，从而表示了它在波中的运动。这意味着粒子在波中的运动受到一种力的影响，此力可从一种与普朗克常数平方成正比的“量子势”中导出。后者取决于波的振幅的二次导数，并可用粒子的静止质量的变化来表示。在单色平面波的情况下，其量子势为零。在 20 世纪 50 年代，他完善了“双重解理论”，认为 u 波实际上满足一个确定的非线性方程，从而提出了自己的“非线性波动理论”。但德布罗意未能具体给出 u 波满足的非线性方程。另外，该理论对多粒子体系和单粒子的 S 波态的描述也有严重困难。由于此理论无一实验支持，而未得到发展。除爱因斯坦对其的支持外，感兴趣的人较少。但是所提的“量子势”概念却使很多人感兴趣。1952 年提出定域隐函数理论的玻姆推导出了量子势的具体表示形式，为 $V = \hbar^2 \nabla^2 R / 2mR$ ， R 是薛定谔波 $\psi(\vec{r}, t) = R \exp(i\theta)$ 的振幅。玻姆将这个量子势带入到粒子的运动方程，并认为量子势的“瞬间超距”作用可使测量过程受到干扰作用。1966 年在提出的玻姆-波布隐函数理论中，他们再次加进量子势和非线性作用于薛定谔方程中，并想通过客体、环境和隐函数之间的关系来规定这个非线性项满足的方程的具体形式，以此来研究所引起的粒子的性质的改变情况。人们企图想使微观粒子变化成为可测的。但是，最终未能得到所理想的结果。

尽管上述努力未能改变量子力学所存在的问题，但给予我们很多有用的启示。

(1) 量子力学需要改进和发展，而发展始终是量子力学的主题。(2) 量子力学改进的目的是使微观粒子局域，变成一个具有波-粒二象性的物理粒子。(3) 量子力学改进的方向就是建立非线性量子力学，把非线性相互作用加进薛定谔方程，使粒子的性

质改变。但是，应该加的非线性相互作用是否就是他们讲的非线性作用或量子势，是值得研究的。这就是说，对于微观粒子体系，正确的非线性相互作用形式是值得深入和广泛研究的。

1.3.3 非线性科学和孤子理论发展的启示

在 20 世纪 70 年代，由于一些非线性偏微分方程如 KdV 方程用反散射方法求出了解析解。其解是一个能保持振幅不变传播的孤立波或孤子。这一成果大大刺激了偏微分方程和包括孤子物理学在内的非线性科学研究的发展，从而在国际上引发了“孤子热”，不同种类和类型的孤子在各种不同的系统中出现。在这一研究中，孤子的概念是最令人感兴趣的物理概念。何谓“孤子”呢？所谓孤子就是“前无古人，后无来者”，一个孤单单的波动。因此，它具有“粒子”的状态和特性。首先是由罗素在水渠的水流运动中观察到 KdV 孤子的存在。后来又被人推得这种运动可用一个非线性方程描述。其解即是一个波动，又具有粒子的特性，即在两个孤子的碰撞后能保持原有形状向前运动，就像经典粒子的碰撞过程一样。这一结果已经被数值模拟结果和许多实验观察所证实。所形成的孤子是由非线性动力学方程中的色散项和非线性项相互作用并平衡的结果，即使波畸变的非线性作用阻止和抑制了使波变形的色散项，从而使原来色散的波局域为一个孤单的孤立波，变成了一个孤子。长期研究量子力学和超导超流及孤子问题的庞小峰将孤子理论应用于求解超导体中的金兹堡-朗道 (GL) 方程和超流的 Gross-Pitaevskii (GP) 方程，不但解释了超导体和超流体中所发生的宏观量子效应的特点和本质，并求出了在宏观量子状态中准粒子的运动特点及其与非线性相互作用的关系。碰巧，国际上兴起了用非线性薛定谔方程来研究光在光纤中传播的光孤子问题的热潮。庞小峰将孤子的概念引入到量子力学来研究微观粒子的特点。并在这当中，庞小峰首先确定了非线性量子力学中微观粒子所受到的非线性作用最低阶的正确表示形式，又研究了非线性薛定谔方程的孤子解的特性，并和崔洪农一起研究了由非线性薛定谔方程描述的非传播水孤子的运动特点，得出了它具有许多粒子性的特点。如它们在受外力作用时做经典力学规律的运动，在两个孤子的碰撞中具有经典粒子碰撞的特性等。由此，便确定了由非线性薛定谔方程的孤子是局域的，具有经典粒子的特点。这些研究使我们认识到只要计算和考虑微观粒子之间的非线性相互作用就可以抑制和阻止微观粒子的色散效应，使它变成具有粒子特性的局域粒子，显示出粒子的本色。因此，非线性相互作用是微观粒子显示粒子特性的关键因素。从而使我们懂得要发展量子力学就必须考虑非线性作用，发展非线性量子力学便可能解决量子力学本身的困难。庞小峰运用这些理论和结果到微观粒子的量子系统中，通过 20 多年的努力，建立起由非线性薛定谔方程等为主体的非线性量子力学。在 1994 年和 2005 年分别在国内外出版了《非线性量子力学理论》和 *Quantum Mechanics in Nonlinear Systems* 两本专著，并发表了 100

多篇文章，从而解决了微观粒子的局域性和具有的波-粒二象性，确立了它们应遵从的动力学方程，进而建立起了非线性量子力学。通过大会报告、专题讨论和演讲，更加完善了此理论。

习题

1. 分析量子力学的 8 个基本假设与微观客体的特性之间的关系，以及用量子力学描述微观粒子时所显示出来的局限性。
2. 分析在解决量子力学的困难时所提出的“贝尔不等式”、“爱因斯坦与玻道尔斯基和罗森的(EPR)佯谬”与“隐变数理论”等理论的实质和局限性。
3. 分析德布罗意提出的非线性波动理论的特点和实质，以及后来提出的非线性“量子势”的实质和局限性。
4. 分析在量子力学中用波包描述微观粒子的颗粒性的局限性。
5. 详细分析在量子力学中求解氢原子和氢分子问题时用的方法所显示出来的局限性。
6. 用量子力学具体求解锂原子中价电子的运动特点，并深入分析所用的近似方法的实质。

第 2 章 非线性量子力学建立的基础

本章主要研究了宏观量子效应的具体现象和一些特点。阐明了它的非线性量子效应本质，同时研究了具有宏观量子效应的超导和超流体的非线性特性，并利用现有的超导和超流理论来研究其中的微观粒子的非线性运动特性，以此作为建立非线性量子力学的理论基础和实验基础。

2.1 宏观量子效应及其特点

所谓宏观量子效应，是在宏观尺度上观察到的量子效应，是一种特殊的物理现象。现在已发现许多物理系统能出现这种现象。下面，我们分别介绍一些物理系统的宏观量子效应。

2.1.1 超导体的宏观量子效应

超导体是指一些元素、化合物和合金，在温度低于某一特定值，即临界温度 T_c 时，电阻突然消失的现象。所形成的电流将无阻地永远流动着，形成永久电流，这称为超导体的完全导电性。现已发现 30 余种元素、上百种合金和化合物都具有这种特性。实验还发现，当物体处于超导态时，可以将原来存在于体内的磁力线完全排出；反之，若在超导体上加一外磁场时，其磁力线也不会穿入体内。这种现象称为超导体的完全抗磁性，也叫做迈斯纳效应。超导体存在许多其他特性，不在这里列出。如何解释这些特性呢？通过 40 多年的努力，1957 年巴丁、库伯和徐瑞弗提出了低温超导理论，即 BCS 理论。该理论认为在超导体中由于电子和晶格振动(声子)的相互作用所提供的吸引力胜过电子之间的库仑排斥作用，从而使具有大小相同、方向相反的动量和自旋的两个电子形成了束缚的电子对，凝聚到同一个最低能态上，出现了高度有序、长程相干的量子状态。处在这种状态中的电子对与晶格之间实际上再无能量交换，因而电子对不再被晶格散射而无阻地流动，从而形成了超导电性。处于超导态中的电子对有点像双原子分子，只是结合能小于后者，它的相对尺寸(即电子的相干长度)约为 10^{-4} cm。这些电子对都具有相同的状态和动量，形成相互相干、长程有序的凝聚状态，便会自然表现出一系列的宏观量子效应来。现已发现的宏观量子效

应包括磁通量子化、第Ⅱ类超导体的涡旋线结构和约瑟夫逊效应等。

1. 磁通量子化。对于一个超导环，在 $T > T_c$ 时，对它施加一磁场，其磁力线穿入到体内和环内。若把温度降低至 T_c 之下，接着把外磁场去掉，由于圆环处于超导，超导电流所产生的磁场抵消了环域的磁场，使圆环体内的磁感应强度 $B = 0$ 。但因环内感应的超导电流消失，因此在圆环孔中仍保留着一部分磁通量，它称为冻结磁通。从宏观量子波函数中可以导出冻结磁通是量子化的，其总的磁通量可写成 $\Phi = n\phi_0$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$)，这里 $\phi_0 = hc/2e = 2.07 \times 10^{-15} \text{ Wb}$ ，称为磁通量子，表示一根磁力线的磁通量。这种磁通量子化意味着什么呢？如果外加在圆环孔洞上的磁场是 $n\phi_0$ ，则这时圆环内的磁通量也刚好为 $n\phi_0$ 。如果外加磁场为 $(n+1/4)\phi_0$ ，则超导环中的冻结磁通量不会是 $(n+1/4)\phi_0$ ，而仍是 $n\phi_0$ 。相反，如果外加磁场为 $(n+3/4)\phi_0$ ，则超导环孔洞内的磁通量应为 $(n+1)\phi_0$ 。这就是说，孔洞内的磁通量始终是量子化的。1961 年通过实验证实了这个效应，从而使超导态显示出宏观量子效应。利用磁通量子化，我们可以做成量子磁强计，用它来测量微弱的磁场，其灵敏度可达 3×10^{-7} 奥斯特；改装一下结构形式，可制成灵敏电流计，最小可测 $2.5 \times 10^{-9} \text{ A}$ 的电流。

2. 第二类超导体中的涡旋结构。对于金兹伯格-朗道参数 $k > \sqrt{2}$ 的第二类超导体，如 NbTi 合金和 NbSn 化合物等，当外磁场 H 大于超导体的下临界场强 H_{c1} 时，磁场会部分穿透到体内，使超导体的一些小区域由超导态变为正常态。在此小区域内可形成一些圆柱形的结构，并有规则地排列(如图2.1所示)。实验测得，每个圆柱形涡旋线的磁通量刚好等于一个磁通量子 ϕ_0 。对于一个理想的第二类超导体，这些涡旋线稳定地排列成一个三角形，其相应的超导电流和磁场分布示于图2.1中。对于非理想的第二类超导体，这些涡旋线结构也是量子化的，但分布不是很规则。我们可以求出每一根涡旋线的能量以及涡旋线之间的相互作用能，也可以证明两根平行的磁通线是相互排斥的，而两根反平行的磁通线之间是相互吸引的。

3. 约瑟夫逊效应。从量子力学知道，电子等微观粒子都可穿越势垒而运动。因此，在加电压于一定厚度的绝缘或金属层势垒上可形成电流，这称为电子的隧道效

应。若在两块超导体之间放一个绝缘体或金属层，其厚度约为 3 nm 左右时，由于超导电子对的长程相干效应也会产生隧道效应，称为约瑟夫逊效应，是由约瑟夫逊首先发现而得以命名的。这种现象也可以出现在超导体-超导体及超导桥等多种弱连接的超导体上。这种弱连接的超导体既具有大块超导体的一些特性，如可以负载一定的超导电流，又具有如下的特殊性质，即

(1) 当在超导体上通一直流电流时，若它小于一特定值 I_c ，结上就不出现电压，而 I_c 约在几十 μA 到几十 mA 之间。在 $V=0$ 时，这称为直流约瑟夫逊电流，对于 Sn-SnO-Sn 超导结的结果如图 2.2 所示。

(2) 若在结的两端加上一个恒定电压 V 时(电流已大于 I_c)，结区出现高频的超导正弦电流，其频率为 $\nu=2eV/h$ ，并以同样的频率向外辐射相干的电磁波，其频率在微波和远红外波段 $(5\sim 1000)\times 10^9\text{ Hz}$ 内。可认为它是由恒定电压 V 引起的交变约瑟夫逊电流产生的频率为 ν 的电磁波在沿着结平面传播至结和外界空间的交界处时，其中一部分电磁波从交界面反射回来，另一部分传播至结外，从而出现辐射相干电磁波的现象，其辐射功率的大小取决于它和外空间的匹配程度。

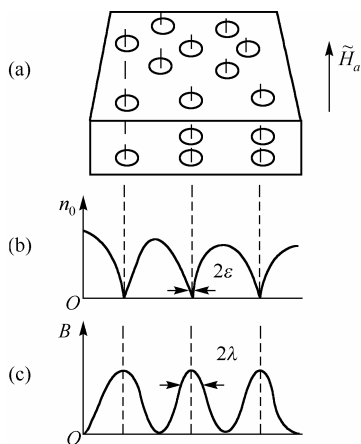


图 2.1 在第 II 类超导体中电流和磁场的分布

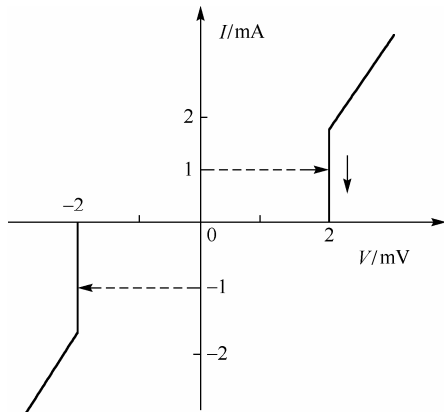


图 2.2 在 Sn-SnO-Sn 超导结中的约瑟夫逊效应

(3) 若在结上加一外磁场时，会使结上的直流电流 I_c 的大小随磁场的增加而出现周期性的变化，并在 I_c-H 曲线上出现与光学中的夫琅和费衍射形成的光强分布图像相类似的结构(如图 2.3 所示)，其周期恰好是 H_0 。这称为超导结的超导量子衍射现象。

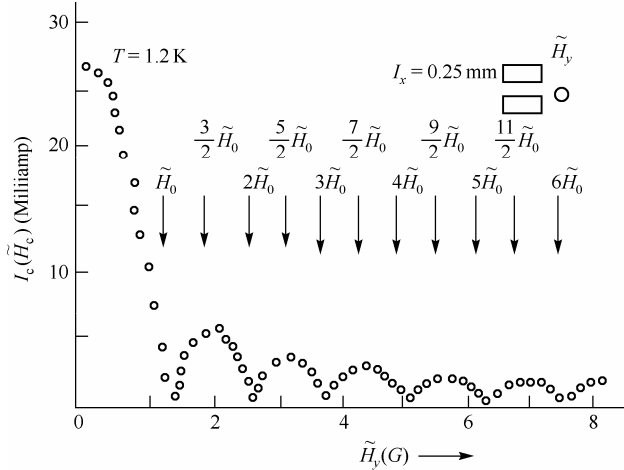


图 2.3 超导结中的量子衍射效应

(4) 当结受到微波辐射场作用时，改变施加在结上的电压，发现通过结区的直流电在某些分立的电压值下突然增大，在直流的 I - V 特征曲线上出现一系列电压、电流阶梯，其阶梯处的电压 V 和微波辐射场的频率 ν 之间有 $n\nu = 2eV_n/h$ ($n = 0, 1, 2, 3, \dots$) 的关系，这种阶梯在实验上已发现可到 500 级以上。

以上现象统称为约瑟夫逊效应，其中性质(1)和性质(3)是直流约瑟夫逊效应，其他均为交流约瑟夫逊效应。它首先由约瑟夫逊本人从理论上推出，后来都被实验结果一一证实。

由性质(2)、性质(3)和性质(4)可以看出，约瑟夫逊效应是一种宏观效应，它可以用宏观量子波函数来解释。对于弱连结的两块超导体中的波函数之间存在一个确定的相位差而相互关联，以使超导电子对可在一个方向上发生优先迁移，从而形成了直流约瑟夫逊电流。当在结平面上加一个磁场时，可使整个相位差产生一个空间梯度，迫使最大超导电流随磁场发生振荡。若在结上加一个电压，就会使相位差随时间变化，由此引起了交流约瑟夫逊效应。

2.1.2 超流液氦中的宏观量子效应

氦气是一种常见的惰性气体，也是最难液化的气体，它可以 ^4He 和 ^3He 同位素形式存在。在通常的氦气中，大多数是 ^4He 。它的沸点为 4.2 K， ^3He 的沸点为 3.19 K，临界压力为 1.15 个大气压。 ^4He 和 ^3He 一样，由于质量轻而具有极高的零点能，从常温一直到接近绝对零度还可保持液态。只有加压才使原子之间的距离缩小，并在内聚力起作用的情况下方能变成固态，例如 ^3He 要在 25~34 个大气压下才能固化。

对于 ^4He , 当在 $T < 0.319\text{ K}$ 的一定温度范围内加压结晶时, 反而会吸热; 或者说在加压状态下, 甚至可升温, 会吸热结晶, 这称为帕米兰丘克效应。这个结果表明在这一温度时, 熔体的熵比晶体时还小(即熔体更加有序)。这些奇特的性能都与 ^3He 和 ^4He 的特殊内部结构相关。

^3He 和 ^4He 都具有体心立方和六角密堆这两种晶体结构。 ^4He 在一个大气压和 2.17 K 时发生相变。在 2.17 K 以上时, 它与普遍液体一样, 称为 HeI 。当温度降低为 2.17 K 以下时, 即为 HeII 。 HeII 与 HeI 全然不同, 出现了奇妙的超流特性, 液体 HeII 可以无阻地通过一个直径小于 10^{-5} cm 的毛细管, 且流速与压强差及管道长度无关, 黏滞度小于 10^{-11} P 。若把一个试管放在液体 HeII 中, 其液面与液池的液面相同, 然后把试管提起来, HeII 可以沿着试管壁向上爬并翻过试管口再沿着外壁进入液氦池中, 直到液体流完为止。这种性质称为 HeII 的超流性。1972 年奥谢罗夫等人在冷却 ^3He 的固液混合物中发现 ^3He 在 2.6 mK 和 2 mK 有两个相变点。实验测得 ^3He 在 3.19 K 时凝结成液体, 在 $3 \times 10^{-3}\text{ K}$ 以下能转变为超流体。其相图在零外场下, 它存在 ^3HeA 和 ^3HeB 两个超流相, 在几千高斯的强磁场中有 3 个超流相存在。其 T_c 分裂为 T_{c1} 和 T_{c2} 。在 T_{c1} 以上为正常 ^3He 流体, 在 T_{c1} 和 T_{c2} 之间为 $^3\text{HeA}_1$ 相, 在 T_{c2} 和 T_{AB} 之间为 ^3HeA 相。而 ^3HeA 和 ^3HeB 都是各向异性的。

实验得知, 对液氦超流相 $^4\text{HeII}$, ^3HeA 和 ^3HeB 相存在着与超导体中的磁通量子化相类似的环流量子化及涡旋线结构。若用宏观波函数的相位 θ 的梯度表示超流速度 v_s , 则有 $v_s = \hbar \nabla \theta / M$ 。其中, M 是氦原子质量。只要转动的超流液氮的速度超过某一临界速度时, 就会在氦液中产生旋涡。这种涡旋的环流(或者说涡旋线的能量)是量子化的, 其环流的量子化可写成 $\oint v_s dr = n\hbar / M (n=1, 2, 3, \dots)$, 其量子单位为 \hbar / M 。1963 年有人测得了涡旋线的环流(或者说涡旋线的能量), 得知它是量子化的, 其结果和理论值一致, 从而证实了这个环流量子化现象的存在。若超流液氮不转动, 此时, $\nabla \times v_s = 0$ 。根据量子化条件, 可得出超流液氮流过一个直径逐渐减少的管子时, 粗管和窄管处的压强是一样的, 这和普通流体全然不同, 并已为实验所证实。

后来, 美国的费尔班克和马斯顿用实验观察到了 $^4\text{HeII}$ 的宏观量子效应。在 2.17 K , 并使超流的 $^4\text{HeII}$ 旋转, 则在临界温度下, 它会形成涡旋, 此时便有一有效黏度, 就像在杯子中扰动液体一样, 表面上会出现一倾角, 其表面的横截面实际上是条抛物线。(在表面上液体的边缘有向下往中心汇聚的趋势, 可与在不同半径上的不同离心力相抵消。)这种特定涡旋的角动量很小, 仅由少数分立的量子包所组成。而量子包的角动量可用量子理论表示出来。这就是说, 对一定的超流氦, 涡旋只能在某些分立范围内存在。从实验中他们得到了角动量足够大的涡旋, 并可用可见光观察其表面形状。他们将一薄层超流体氦旋转, 并用 632.8 nm 的氦-氖激光从上、下表面照明, 对所得到的涡旋

加以观察时发现, 反射光束合在一道, 形成了明暗相间的干涉条纹图。该图形表明, 表面现象确实有一倾角, 而且可将表面的正确形状绘制出来。这种条纹和理论曲线十分符合, 从而又一次用实验证实了超流液 $^4\text{HeII}$ 的量子化涡旋环的存在。

关于 $^4\text{HeII}$ 的超流性和所发生的宏观量子效应被很多人从理论上加以研究过。在 20 世纪 40 年代, 波戈留波夫用理想玻色气体模型计算出了 $^4\text{HeII}$ 发生玻色-爱因斯坦凝聚的临界温度为 3.3 K, 与实际测得的 2.17 K 接近。他们认为在低于 T_c 后, 一部分 He 原子凝聚到动量为零的状态上。根据 $\lambda = h/p$ 的关系, 这时每个 He 原子的波函数的波长接近无穷大, 所发生的凝聚在整个空间形成了长程有序的超流状态, 从而显示出宏观量子效应。其凝聚的原因就在于当温度低于 T_c 时超流氦原子体系出现的非线性相互作用, 使体系的对称性自发破缺, 则 He 原子彼此相互相干, 形成了有序的超流态。

2.1.3 量子霍耳效应

金属等在纵向电场和横向磁场作用下, 在垂直于它们的方向会出现电荷的堆移, 形成霍耳电场和电流, 这种现象称为霍耳效应, 常用霍耳电阻来表示这一效应。我们这里讲的霍耳效应是指对一个特殊量子系统在极低温度和量子力学极限条件下, 霍耳效应的电压-电流曲线出现一些阶梯形状, 而霍耳电阻将以一个基本电阻为单位呈现量子化的现象, 从而在宏观尺度上显示出量子效应。

量子霍耳效应的概念, 最早是由东京大学安藤恒也提出的, 而后的几年由克得青及其合作者从实验加以证实。他们在一个金属氧化物半导体场效应晶体管的氧化物表面下方的硅的反型层中, 形成了一个二维的简并电子气体。将样品冷却到 1.5 K 并用晶体管的正门栅电压产生一个势阱, 高度简并的电子气被限制在这个势阱的基态上, 在“门”下垂直于氧化硅表面的电场有效地阻止了向垂直于表面的 z 方向运动的电子而被捕获。如果在 z 方向加一个磁场 H_z , 而在垂直于它的 x 方向加一个电压 E_x , 则在洛伦兹力的作用下, 体内电子将偏离 x 方向, 向 y 方向运动, 从而出现通常的霍耳效应。但是如果将磁场增加到 150 kg 时, 简并的电子基态被破坏, 分裂为朗道能级, 处在第 N 个朗道能级上的电子的能量为 $(n+1/2)\hbar\omega$, ω 为正比于磁感应强度 B 的圆频率。这些朗道能级表现为围绕这个场, 其经典半径大约为 7 nm 的电子轨道。当调制门电压使此系统的费米能级移到两个朗道能级之间时, 在这个费米能级之下的所有朗道能级全部占据, 而费米能级以上所有能级空着。由于 E_2 和 z 方向磁场 H_z 的作用, 被占据了的朗道能级上的二维气体中的电子, 将向 y 方向移动。但在

电场方向上不出现电流。当有一个垂直于电场方向的电流加在样品上时，其电导率的对角项 $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = 0$ ，非对角项即为霍尔电导率 σ_{xy} 。在简并情况下，可表示为 Ne/B (这里 N 是电子的二维密度)。当有 n 个朗道能级被占据时， $N = nBe/h$ ，而霍尔电阻为 $R_H = h/ne^2$ ，即它是不依赖于物质的特征参数。由此可知，霍尔电阻是量子化的，其量子单位为 h/e^2 。克利青等人对长 $400\text{ }\mu\text{m}$ ，宽 $50\text{ }\mu\text{m}$ ，势探针测距为 $130\text{ }\mu\text{m}$ 的样品进行了测量，则在第 n 个平台处测得霍尔电阻精确等于 h/ne^2 。而后贝尔实验在稍低的磁场和温度下，从 $\text{GaAs-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 异质结中观察到了同一现象。后来，又观察 n 等于分数的反常量子霍尔效应。用此效应，可更加精确测定 h/e^2 值和精细结构常数 $\alpha = e^2/h(\mu_0 c^2/2)$ (这里 μ_0 为真空磁导率)。

2.1.4 其他宏观量子效应

1. 单原子自旋极化氢。氢原子是玻色子，遵守玻色-爱因斯坦统计。由于它的质量极小，有极高的零点振动能，因此在常压下，即使在趋近于 0 K 时，仍可保持弱相互作用的原子气体状态。但是，当加高压，使原子氢的密度达到某一个极高值时，其状态会发生变化。若其密度超过某临界值时，继续增长的原子数会转移到一个能量极低的状态，其时会出现凝聚。这就是说，当温度低于临界温度 T_c 时，原子氢的德布罗意波长等于原子间距 r_0 的条件下，在一个有大量原子氢的体系内，相当一部分原子氢因彼此结对而占据同一量子态，发生玻色-爱因斯坦凝聚。同时发生比热容，磁化率等的反常跳跃。理论计算得知，在原子氢的密度 $\rho > 10^{16}/\text{cm}^3$ 时会产生这种凝聚。其凝聚的温度 T_c 随密度 ρ 的增加而增大。在 $\rho = 10^{17}/\text{cm}^3$ 时， $T_c = 80\text{ mK}$ ；在 $\rho = 10^{19}/\text{cm}^3$ 时， $T_c = 100\text{ mK}$ 。

理论上还确定，只有当原子氢处在自旋向下的三重态时，才有可能发生玻色-爱因斯坦凝聚。此时系统处于一个能量极低的稳定状态中。因此，还需要给体系加一个梯度磁场，从中选取出自旋方向相同的极化氢，以减少在此高密度下原子复合为氢分子的可能性，这时才有可能出现凝聚，所要求的磁场大约为 $9\sim 11\text{ T}$ 以上。目前，未能实现使氢原子压缩到 $10^{19}/\text{cm}^3$ 的水平，所以从实验上观察自旋极化氢的凝聚和所发生的宏观量子效应的工作还未实现。

2. 激子玻色-爱因斯坦凝聚。现在已发现在锗、硅、硫化镉、砷化溴、碳化硅和钽等材料中的一个电子和一个空穴，由于库仑引力的作用，会形成一个稳定的电子空穴束缚态，即激子。每一个激子都有一定的有效质量、能量和动量，它不但可以绕着自己的质心转动，也可以穿过晶格，在晶格中自由运动。在密度增高时，两个自旋相反的激子之间存在着一个吸引力，从而形成具有波色子性质的激子分子。当体系的温度低于一个

临界温度时，这些激子分子会凝聚到动量为零的基态上，产生玻色-爱因斯坦凝聚，从而会出现像液氦中的超流性。由于一个激子分子的平均质量与电子质量的比值比 ^4He 中的相应值小了一个数量级，因此，激子体系的量子效应比液氦更为明显。当有相当多的激子分子占据同一量子态时，那么在发射光谱中会出现相强的特征谱线。1974 年，日本、瑞士等国学者在对高纯 AgBr 样品中的自由激子复合辐射的低能谱的测试中，观察到非常尖锐的发射线。还观察到了一个类似于超导衍射实验中看到的阶梯图像，后来又在很窄的激发功率密度范围内 $[(50 \sim 100) \times 10^5 \text{ W/cm}^2]$ ，在 $E_{Qx} - E_m = 1.895 \text{ eV}$ 处观察到非常尖锐的发射线。人们认为是一种宏观量子效应，与超流液氦及超导体类似，亨 (Hag) 等人还预言了发生玻色-凝聚的激子体系会导致能量的超流。

3. 白矮星和中子星中的宏观量子效应。白矮星的质量是太阳质量的 1.4 倍，但比太阳的半径小 100 倍，约为 $10^3 \sim 10^4 \text{ km}$ ，和地球半径接近。中子星的质量约为太阳的 2 倍，半径约为 10 km。因此，它们都是高度致密的类星体，前者平均密度为 $10^6 \sim 10^8 \text{ km/m}^3$ ，后者为 $10^{17} \sim 10^{18} \text{ km/m}^3$ ，比太阳的密度大得多。在这样高的密度下，白矮星中的电子和中子星中的中子都处于高度简并状态，它们产生的简并压力平衡了星体内的强大引力，从而维持一个稳定状态。在白矮星中，在一个低的温度和高密度下，这些高度简并的电子气体靠其自相互作用，可形成束缚的电子对，出现长程相干的状态，产生超导永久电流，并在白矮星表面呈现出很强的磁场。现代实验已证明白矮星表面磁场为 $10^6 \sim 10^7 \text{ Gs}$ 。比太阳表面磁场 (1 Gs) 大得多，并不断向外辐射能量和电磁波，这就说明了白矮星内可能出现了凝聚，也可能产生了宏观量子效应。中子星是一个直径为几十千米的巨大量子力学系统，它的固态外壳层由点阵结构的 Fe^{56} 裸核和简并电子气组成，其密度高达 10^9 km/m^3 ，内部密度的增加导致原子核结构改变。在密度为 $4.3 \times 10^{14} \text{ km/m}^3$ 时形成自由电子。因此，这一壳层由原子核、自由电子和中子组成。在 10^{15} km/m^3 的高密度下出现中子超流性，质子产生超导现象。由于中子和质子都具有磁矩，它们的超流环流便可产生很强的磁场。这磁场再加上它的高旋转便可产生 10^{12} V/cm 的表面静电场。在中子星内部，超流的中子形成一系列的小涡旋流，其涡流轴都平行于恒星的旋转轴。根据现有理论计算，在一个三角点阵上，每平方厘米中大约有 10^4 个这样的涡流存在。再加上实验已观察到的中子星的强大的电磁辐射 (人们认为它是中子产生的强大的磁场加速了表层的自由电子而产生的) 等现象，便可说明在中子星中产生了凝聚和出现了宏观量子效应。

2.2 宏观量子现象是一种非线性量子效应

2.2.1 宏观量子效应的本质

宏观量子效应是一种非常奇特的效应和现象，对它进行研究将使我们不但能弄清楚在极低温、高压等特殊条件下，电子、原子、中子、质子等微观粒子的运动规律，而且将深化我们对相干态凝聚、相变和临界现象等物理问题的认识。但它的本质是什么呢？

由于物体的宏观性质是由组成它的大量粒子集体运动和相互作用的结果。则宏观量子效应也不例外，与大量量子在一定条件的集体相互作用相关。从量子理论可知，组成物体的微观粒子如原子、电子、原子核等都具有量子特征。当在一定外界条件和内因作用下(如极低温、高压或高密度等条件下)，所有粒子彼此相互相关结对，并“凝聚”到单一的状态上，以形成高度有序、长程相干状态。在这种状态中，所有粒子的行为几乎完全相同。大量粒子的整体运动，就和其中一个粒子的运动一样。由于一个粒子的运动是量子化的，则由这些大量粒子组成的相干系统的集体运动就可能表现出宏观量子效应来。因此，大量粒子的“凝聚”形成相干状态的特性在这种现象中起着重要作用。

何谓“凝聚”呢？如我们所知，在宏观领域中，气体变为液体的相变过程(如水蒸气变成水的过程)就称为凝聚，这是液体分子位置状态的改变，凝结成高密度的物质。而这称为位置的凝聚。所发生的是一级相变，即有明显的体积变化和潜热出现，凝结时压强只与温度有关，而与体积无关，但热力学函数是连续的，无奇异性。这里所讲的“凝聚”和位置凝聚有本质上的不同。它是在动量空间里大量粒子聚集到单一能态上或凝结到动量为常数或零的最低状态上，因此称为动量的凝聚，应归为第三级相变(但实际上仍属于二级相变)，是因为它与热力学函数的三阶导数的不连续相关。其本质是系统处在一个特定条件(如极低温度和高压)时，由于内部的非线性自相互作用，使体系的对称性自发破坏后造成的。实验测得此时的比热容、磁化率等发生跳跃。但不同物质的这类凝聚的温度各不相同。超导和超流性就是一种凝聚，超导体的凝聚温度就是它的临界温度 T_c ，超流 ^4He 为 2.17 K(在一个大气压时)，超流 ^3He 为 10^{-3} K(在一个大气压时)。虽然参加凝聚的基本粒子有玻色子和费米子，但实际凝聚的实体都是玻色子或准玻色子。这意味着当参与凝聚的粒子是费米子时，则它们会束缚为对态，以准玻色子形式参与凝聚。因而，以上的凝聚统称为玻色-爱因斯坦凝聚。这是因为玻色子遵从玻色-爱因斯坦统计分布规律，它们的聚集和分布特征与费米子不同，不遵守泡利不相容原理，即在同一能态上容许的粒子数目不受限制。这意味着它们之间存在一种吸引相互作用。在高温下，玻色子可以分布在许多不同能

态上, 每一个能态上可由一个或多个, 也可以没有玻色子占据。玻色子在相空间(由广义坐标和动量组成的空间)中存在一个统计性质的吸引作用。从而当温度低于某一临界温度时, 其吸引作用能大于无规热运动性, 则其吸引作用可使粒子结合和群聚, 使大多数或全部玻色子会凝聚在同一能态(如最低量子态)上。由此产生了玻色凝聚, 导致一系列奇妙的宏观量子效应的出现。此时只要用一个粒子的波函数就可以描述整个体系的状态了, 即描述由大量粒子组成的宏观态就可以像描述一个粒子的运动那样简单。此状态的波函数可以写成 $\phi = \varphi \exp(i\theta)$ 的形式, 其模的平方不再是原来量

子力学中找到一个粒子出现概率的表述意义, 而是表示微观粒子在该点的密度。故在宏观量子效应或超导与超流体中这一波函数又称为宏观波函数或序参量。超导和超流等中所出现的宏观量子效应可以用它和它满足的运动方程的解来加以说明, 其中相位 $\theta(x, t)$ 既可能对所有粒子都是相同的, 又可能相差一个固定的常数, 即它们是相干的。受这一思想启发, 可使我们清楚了解到, 超导态就是在非线性作用下, 体系在对称性破缺后经二级相变形成的。它就是一种相干态和玻色凝聚态。从而可以肯定超导体及其产生的宏观量子效应是一种非线性量子效应。

2.2.2 宏观量子现象的非线性作用方程

现以一个理想的宏观量子系统(如超导体)为例来研究它的非线性量子特性。从朗道等人给出的超导系统的自由能公式和超导态的特点(高度有序, 熵 $S = 0$), 不难给出超导系统的哈密顿函数。在 $m = \hbar = c = 1$ 自然单位制下, 对于一个具有稳定的宏观量子效应的超导系统, 可用一个简化的模型表示出系统的基本特性。在这个简化模型中, 在无外场时系统的哈密顿量应为

$$H = \int H dx = \int \left[-\frac{1}{2} |\nabla \phi|^2 - \alpha |\phi|^2 + \lambda |\phi|^4 \right] dx \quad (2.1)$$

在有外场如电磁场时, 应为

$$H = \int H dx = \int \left[-\frac{1}{2} |(\partial_l - ie^* A_l) \phi|^2 - \alpha |\phi|^2 + \lambda |\phi|^4 + \frac{1}{4} F_{lj} \cdot F^{lj} \right] dx \quad (2.2)$$

式中, $F_{lj} = \partial_l A_j - \partial_j A_l$ ($l, j = 1, 2, 3$) 是协变场强, 其中 \vec{A} 是电磁场的矢势, 其磁场强度 $\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$, $e^* = 2e$ 。Jacobs 和 Rebbi, de Gennes 及 Saint-James 等人以及 Leplae 等人曾使用过这类哈密顿函数, 并推导出了 GL 方程。从式(2.1)和式(2.2)可见, 此系统的哈密顿量包含有非线性相互作用项 $\lambda |\phi|^4$ 项, 因此它是非线性相互作用哈密顿量。显然它具有 $U(1)$ 对称性, 即在变换 $\phi(x, t) \rightarrow \phi(x, t) e^{-i\theta Q}$ 下它是不变的。如果把式(2.1)对应的哈密顿密度函数写成

$$H = -\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + U_{\text{eff}}(\phi), \quad U_{\text{eff}}(\phi) = -\alpha\phi^2 + \lambda\phi^4 \quad (2.3)$$

则有效势能 U_{eff} 具有两组极值, 即 $\phi_0 = 0$ 和 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 。此时系统的能量具有一个极值, 但在 $\phi_0 = 0$ 时, 这个极值能量 ($U_{\text{eff}} = 0$) 并不是最小值, 只有在

$$\phi_0 = \langle 0|\phi|0\rangle = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2} \quad (2.4)$$

时的能量是比 $\phi = 0$ 态的能量更低, 并且大约低 $-\alpha^2/2\lambda$ 。故应当认为 $\phi = 0$ 是正常的基态, $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 则是超导基态。因此, 超导态是系统的稳定态。所以, 正常态的哈密顿函数不应同于超导态的哈密顿函数。所谓正常态就是未考虑上述非线性作用, 而由线性量子力学描述的态, 与超导态则好相反。同时, 对于超导态的两个基态在 $\phi \rightarrow -\phi$ 的变换下具有 $\langle 0|\phi|0\rangle \neq -\langle 0|\phi|0\rangle$ 特性, 即不再具有 $U(1)$ 对称性, 它的基态发生对称性破缺。显然, 这是由于超导系统中非线性相互作用 $\lambda|\phi|^4$ 项存在引起的。这是因为当 $\lambda = 0$ 时, ϕ_0 值一定为 0。故此, 这称为对称性自发破缺。根据朗道二级相变理论, 这时体系应发生二级相变, 由正常基态 $\phi_0 = 0$ 变化为超导基态 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 。为了能够得到新基态的期待值为零, 必须做变换:

$$\phi' = \phi + \phi_0 \quad (2.5)$$

$$\text{有} \quad \langle 0|\phi'|0\rangle = 0 \quad (2.6)$$

则系统的哈密顿密度函数变成

$$H(\phi + \phi_0) = -\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2 + (b\lambda\phi_0^2 - \alpha)\phi^2 + 4\lambda\phi_0\phi^3 + (4\lambda\phi_0^3 - 2\alpha\phi_0)\phi + \lambda\phi^4 - \alpha\phi_0^2 + \lambda\phi_0^4 \quad (2.7)$$

将式(2.4)代入式(2.7), 可得

$$\langle \phi_0|(4\lambda\phi_0^2 - 2\alpha)|\phi_0\rangle = 0$$

现在对基态求 $\frac{\delta H}{\delta \phi}$ 的期待值的极值, $\left\langle 0\left|\frac{\delta H}{\delta \phi}\right|0\right\rangle = 0$, 从式(2.1)可得

$$\left\langle 0\left|\frac{\delta H}{\delta \phi}\right|0\right\rangle = \langle 0|-\nabla^2\phi + 2\alpha\phi - 4\lambda\phi^3|0\rangle = 0 \quad (2.8)$$

在式(2.5)的变换后, 有

$$\nabla^2\phi_0 + (4\lambda\phi_0^2 - 2\alpha)\phi_0 + 6\lambda\phi_0\langle 0|\phi^2|0\rangle + 4\lambda\langle 0|\phi^3|0\rangle - (\alpha - 6\lambda\phi_0^2)\langle 0|\phi|0\rangle = 0 \quad (2.9)$$

这里 $\langle 0|\phi^3|0\rangle$ 和 $\langle 0|\phi|0\rangle$ 项都等于 0，其中基态的涨落项 $6\lambda\phi_0\langle 0|\phi^2|0\rangle$ 是不等于零的。

对于均匀超导体在 $T=0\text{ K}$ 时， $\langle 0|\phi^2|0\rangle$ 是很小的，以至可以忽略它。则式 (2.9) 变成

$$-\nabla^2\phi_0 - \phi_0(4\lambda\phi_0^2 - 2\alpha) = 0 \quad (2.10)$$

由此式也可以得到 $\phi_0 = 0$ 和 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 两组解。若进行很小的移动，即

$\phi_0 \rightarrow \phi_0 + \delta\phi_0 = \phi'_0$ ，则对于 $\phi_0 = 0$ 的正常基态的涨落 $\delta\phi_0$ 所满足的方程为

$$-\nabla^2\delta\phi_0 + 2\alpha\delta\phi_0 = 0 \quad \text{或} \quad \nabla^2\delta\phi_0 - 2\alpha\delta\phi_0 = 0 \quad (2.11)$$

由此得到的解 $\delta\phi_0$ 是指数衰减的，即 $\phi_0 = 0$ 的基态是不稳定的。但对 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 的基态的涨落 $\delta\phi_0$ 所满足的方程为

$$-\nabla^2\delta\phi_0 - 4\alpha\delta\phi_0 = 0 \quad \text{或} \quad \nabla^2\delta\phi_0 + 4\alpha\delta\phi_0 = 0$$

即 $\delta\phi_0$ 具有振荡的解，因此在 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 的超导基态是稳定的，它比正常基态的能量低 $\varepsilon_0 = -\alpha^2/2\lambda < 0$ 。所以在 $T=T_c$ 时，所有电子以电子对的形式都会凝聚到超导基态中，而不是填充在 $\phi_0 = 0$ 的正常基态上。这种从 $\phi_0 = 0$ 到 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 的变化是由非线性作用引起的对称性自发破缺产生的。从这些关系式还可推导出发生这种相变的临界温度 $T_c = 1.14\omega_p e^{-\frac{1}{(3\lambda/\alpha)N(0)}}$ ，并可进一步求出超导态的迈斯纳效应和系统的比热容。它们都与 BCS 理论公式基本一致。

当电磁场 A 存在时，用类似方法从式 (2.2) 可以得到同样的结论。最后，能从中得出超导态是一种超导电子对的玻色凝聚态。还可以证明它是一种相干态。

2.2.3 宏观量子状态是一种相干态

由式 (2.1)，当 $\delta H/\delta\phi = 0$ 时，可得

$$\nabla^2 - 2\alpha\phi + 4\lambda|\phi|^2\phi = 0 \quad (2.12)$$

让 ϕ 向产生和消灭 b_p^+ 和 b_p 展开，即进行正则量子化，有

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}} (b_p e^{-ip\cdot x} + b_p^+ e^{ip\cdot x}) \quad (2.13)$$

在对称性自发破缺后， ϕ 的基态 ϕ_0 不再为零，而为 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 。因此，消灭

算符 b_p 对它的作用不再为零, 即 $b_p|\phi_0\rangle \neq 0$ 。在式(2.6)的变换下, 定义一个新场 ϕ' , 其中 ϕ_0 是标量场, 它满足式(2.10)。显然, ϕ_0 也可以展开为 $\phi_0 = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_p \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}} (\xi_p e^{-ip \cdot x} + \xi_p^+ e^{ip \cdot x})$ 。则在 ϕ' 场和 ϕ 场之间的变换很显然存在一个么正变换, 即

$$\phi' = U\phi U^{-1} = e^{-S}\phi e^S = \phi + \phi_0, \quad S = i \int [\phi(x'', t)\phi_0(x'', t) - \phi_0(x'', t)\phi(x'', t)] dx'' \quad (2.14)$$

由式(2.14)可知, 新场 ϕ' 的消灭算符 a_p 和 ϕ 场的消灭算符 b_p 存在有

$$a_p = e^{-S} b_p e^S = b_p + \xi_p, \quad \xi_p = \frac{1}{(2\pi)3/2} \int \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_p}} (\phi_0(x, t) e^{ip \cdot x} + i\phi_0^*(x, t) e^{-ip \cdot x}) dx \quad (2.15)$$

因此, 新基态 $|\phi'_0\rangle$ 和原基态 $|\phi_0\rangle$ 存在有关系: $|\phi'_0\rangle = e^S |\phi_0\rangle$ 。于是有

$$a_p |\phi'_0\rangle = (b_p + \xi_p) |\phi'_0\rangle = \xi_p |\phi'_0\rangle \quad (2.16)$$

根据相干态的定义, 由式(2.16)表示了新基态 $|\phi'_0\rangle$ 就是一种相干态。由于这种相干态是在对称性自发破缺后形成的, 所以称为自发相干态。但当 $\phi_0 = 0$ 时, 新基态与老基态相等, 而且新基态不再是相干态。

若用 Boboliubov 在超流液氦 ^4He 中所采用的方法, 可证明这种状态是一种玻色凝聚态。并且, 可求得在超导基态 ϕ_0 的凝聚为 $\frac{N_0}{V} = \frac{\alpha\varepsilon_0}{4\lambda} = \frac{\varepsilon_0}{2} \phi_0^2$, 这里 $N_0 = \langle b_0^+ b_0 \rangle$ 是超导态的超导电子(玻色子)数。于是, 超导态的基态确为 $\phi_0 = \pm \left(\frac{\alpha}{2\lambda} \right)^{1/2}$ 。因此在玻色凝聚后产生的超导基态的状态密度 N_0/V 刚好相应于超导场对基态的平均值。因此, 在对称性自发破缺后形成的超导基态的确是一种玻色凝聚态。对于存在电磁场时, 也可以用同样的方法证明这个结论是正确的。因此, 可得出在超导系统中由于非线性作用的存在, 引起了体系对称性的自发破缺和二级相变, 从而出现了自发相干态和玻色凝聚现象。这就是宏观量子效应的本质。

2.2.4 宏观量子效应是不同于微观量子效应的新物理效应

从量子力学可知, 微观粒子具有一定的微观量子效应。主要表现在微观粒子的可观察量的分立值能从量子力学的定态波矢量的本征方程求出, 故可以称之为微观量子效应。它和这里讲的宏观量子效应有本质区别, 其区别表现为以下几点。

(1) 从产生原因看, 微观量子效应是具微观粒子被束缚在一个有限空间中产生的; 而宏观量子效应则是微观粒子体系在非线性作用下, 处于一种相干的状态中的集体运动的结果, 即它显示出了微观粒子的集体激发特征。

(2) 从表现形式上看, 微观粒子的量子特征主要表现为它的能量、动量、角动

量等基本物理量的量子化，即单个微观物理量的不连续性。但宏观量子效应则是在宏观尺度上观察到的体系的一些基本特征的不连续性，例如电阻、磁通量、涡旋线、电压等，这种量子效应是实际可观察到的，因此它不同于微观量子效应。

(3) 宏观量子效应是一种凝聚状态和相干态，可以以 N 等于整数和分数的形式出现。而微观量子态则是一种扩展状态，满足一定的量子化条件，参加的粒子可以是费米子也可以是玻色子。但参加宏观量子效应的粒子目前只发现是玻色子或费米子的复合体或准粒子。

(4) 在微观量子效应中，粒子遵从线性微分方程(如 Schrödinger 方程、Dirac 和 Klein-Gordon 方程等)。而在宏观量子效应中，粒子遵从非线性偏微分方程[如式(2.9)和式(2.12)的非线性 Schrödinger 方程(NLSE)]。因此，宏观量子效应和微观量子效应的本质和特点是不相同的。

2.3 超导宏观量子状态中准粒子的非线性运动特性

2.3.1 粒子的状态和动力学方程

如前所述，宏观量子效应是由组成该体系的微观粒子如电子的集体运动的结果。现在来研究在这种宏观量子系统中准粒子的动力学特性。对于超导态，如前所述，则是在电-声子耦合相互作用等所提供的非线性相互作用下，使体系对称性自发破缺之后形成的高度有序的相干态(或自发玻色凝聚状态)。按照 BCS 低温超导原理论，这种状态中的超导电子(Cooper 电子对)常用一个宏观量子波函数

$$\phi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) \phi_0 e^{i\theta(\vec{r}, t)} \quad \left(\phi_0^2 = \frac{\alpha}{2\lambda} \right) \quad (2.17)$$

来描述。Ginzburg 和 Landau 用它来表示超导系统的自由能。在无外场时，体系的自由能密度为

$$f_s = f_n - \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 - \alpha |\phi|^2 + \lambda |\phi|^4 \quad (2.18)$$

在电磁场 \vec{A} 中，它为

$$f_s = f_n - \frac{\hbar^2}{2m} \left| \left(\nabla - \frac{ie^*}{c\hbar} \vec{A} \right) \phi \right|^2 - \alpha |\phi|^2 + \lambda |\phi|^4 + \frac{1}{8\pi} \vec{H}^2 \quad (e^* = 2e) \quad (2.19)$$

体系的自由能为 $F_s = \int f_s d^3x$ ，其中 $\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$ ，而 $\frac{1}{8\pi} \vec{H}^2$ 也可用协变场强表示为

$\frac{1}{4}F_{ml}F^{ml}(F_{ml} = \partial_m A_l - \partial_l A_m)$ ($m, l = 1, 2, 3$)。用平衡态时自由能极小原理, 即 $\delta F_s = 0$ 或

由式(2.1)求 $\frac{\delta H}{\delta \phi} = 0$, 可导出 ϕ 所满足的方程式为

$$+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi - \alpha\phi + 2\lambda\phi^3 = 0 \quad (2.20)$$

和
$$+\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla - \frac{ie^*}{c\hbar}\vec{A}\right)^2\phi - \alpha\phi + 2\lambda\phi^3 = 0 \quad (2.21)$$

$$\vec{J} = +\frac{e^*\hbar}{2im}(\phi^*\nabla\phi - \phi\nabla\phi^*) - \frac{e^{*2}}{mc}|\phi|^2\vec{A} \quad (2.22)$$

式(2.19)、式(2.20)和式(2.21)就是众所周知的在超导体中的 Ginzburg-Landaw (GL) 方程组。这是一个定态非线性 Schrödinger 方程, 具有明显的非线性特征。方程组中包含有两个未知函数 ϕ 和 \vec{A} , 使得方程组极难求解。许多人采用不同的近似方法, 使之线性化后求出一近似解。显然, 这种做法难以得出正确结果。现在求它的严格解析解。

2.3.2 无外场时准粒子的运动特点

在一维情况时, 式(2.20)变成

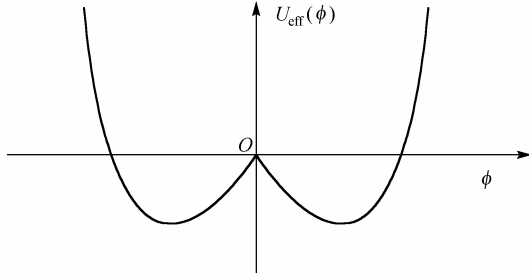
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \alpha\phi - 2\lambda\phi^3 = 0 \quad (2.23)$$

可把式(2.23)写成
$$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = -\frac{d}{dx}U_{\text{eff}}, \quad U_{\text{eff}} = \frac{2m}{\hbar^2}(-\alpha|\phi|^2 + \lambda|\phi|^4) \quad (2.24)$$

U_{eff} 称为系统的有效势能, 如图2.4所示。它有两个极小值, 正好对应于超导体的两个基态 $\phi_0 = \pm\left(\frac{\alpha}{2\lambda}\right)^{1/2}$ 。对应的能量为 $-\frac{\alpha^2}{4\lambda}$ (< 0), 它恰好也是电子束缚为玻色 Cooper 对的结合能, 也正好是与正常基态之间存在的超导能隙的大小。

由式(2.24)决定的非线性有效势 U_{eff} 曲线(如图2.4所示)存在两个不等价基态。当电子处在此状态时, 由电-声子相互作用提供的非线性相互作用阻止了电子能量的弥散, 从而使它形成一个稳定的超导电子-Cooper 对。能证明这 Cooper 对不是别的, 而是一个孤子, 即是一个能量不弥散的“孤单单”的集团。这就是说, 式(2.23)具有孤子解。此解很容易求出, 为

$$\phi = \pm\sqrt{\alpha/\lambda}\text{sech}\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\xi(T)}\right) = \pm\sqrt{\alpha/\lambda}\text{sech}\left[\frac{\sqrt{2m\alpha}}{\hbar}(x-x_0)\right] \quad (2.25)$$

图 2.4 $U_{\text{eff}}(\phi)$ 与 ϕ 的关系曲线

这意味着超导电子不再是一个弥散的扩展态，而是被局域化，具有明显的粒子性。这是众所周知的波包型孤子解。如果 α 与 λ 都反号，则有 Kink 孤子解

$$\phi = \pm \sqrt{\alpha/2\lambda} \text{th} \left[\sqrt{2m\alpha/\hbar^2} (x - x_0) \right] \quad (2.26)$$

由此看出，超导电子在无外场作用时，确实在做孤子运动。如果把 x 象征性地视为特征时间，则式 (2.24) 就类似于量子力学的爱仑菲斯定理或经典力学中的牛顿方程。由此表明这种孤子是按经典规律运动的。这个孤子的能量可从式 (2.25) 求得

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} H dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \alpha\phi^2 - \lambda\phi^4 \right] dx = -\frac{4\hbar \cdot \alpha^{3/2}}{3\sqrt{2m\lambda}}$$

可见，孤子的能量由动能、束缚能和相互作用能组成，它是一个常数，其值与系统的基本参数有关。这再一次显示粒子性的特色。

这个能量和超导态的基态能量之差为

$$E_{\text{kink}} - E_{\text{ground}} = -\frac{\hbar \cdot \alpha^{3/2}}{12\sqrt{2m\lambda}} + \frac{\alpha^2}{4\lambda} = \frac{\alpha^{3/2}}{4\lambda} \left(\alpha^{1/2} + \frac{16\hbar}{3\sqrt{2m}} \right) > 0 \quad (2.27)$$

这表明，超导电子形成的孤子状态不处在系统的基态上，而是一种激发态。它是由系统的非线性作用和色散作用的协同效应产生的两个不等价基态而形成的。对于三

维体系，设 $Y = a_1x + a_2y + a_3z$ ，可从式 (2.22) 求得

$$\phi = \pm \sqrt{\alpha/2\lambda} \text{sech} \left[\frac{a_1(x - x_0) + a_2(y - y_0) + a_3(z - z_0)}{\sqrt{2}\xi(T)(a_1^2 + a_2^2 + a_3^2)^{1/2}} \right]$$

这是三维波包型孤子解。

2.3.3 在有电磁场存在时粒子运动及超导体的涡旋结构

在电磁场 \vec{A} 中的 GL 方程由式 (2.21) 到式 (2.22) 表示。在取 London 规范 $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ 下，

将式(2.17)代入式(2.21)和式(2.22)，它们变成

$$\vec{J} = \frac{+e^* \phi_0^2}{m} \left(\hbar \nabla \theta - \frac{e^*}{c} \vec{A} \right) \varphi^2 \quad (2.28)$$

$$\nabla^2 \varphi = -b\varphi^3 + b\varphi + B^2/\varphi^3 \quad (2.29)$$

式中, $b = \frac{2m\alpha}{\hbar^2} = \frac{1}{\xi^2}$ 和 $B^2 = \frac{m^2 J^2}{\hbar^2 e^{*2} \phi_0^2}$ 。

式(2.29)具有明显的非线性特征。在一维情况时, 它变成

$$\frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{d}{d\varphi} \left(\frac{B^2}{2\varphi^2} - \frac{1}{2} b\varphi^2 + \frac{1}{4} b\varphi^4 \right) = -\frac{d}{d\varphi} U_{\text{eff}}(\varphi) \quad (2.30)$$

这里有效势 $U_{\text{eff}} = \frac{B^2}{2\varphi^2} - \frac{1}{2} b\varphi^2 + \frac{1}{4} b\varphi^4$ 的图像如图 2.5 所示。把式(2.30)与式(2.24)

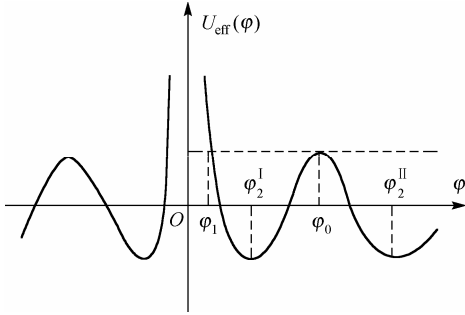


图 2.5 在式(2.30)中的有效势能 U_{eff} 曲线

相对比, 可见它们的形式完全相同, 仅是有效势 U_{eff} 的具体形式不同。由此看出电磁场

A 只改变了超导电子的有效势场, 使其与 ϕ 的关系从图 2.4 变成图 2.5。但是在此情况下, 仍有两个极小值, 相当于在电磁场 A 的作用下, 超导体的两个基态。这说明超导体在此种情况下仍发生了对称性自发破缺, 于是, 超导电子仍会做孤子运动。很容易求出

式(2.30)的孤子解为

$$\varphi(x) = \varphi_0 \text{th} \left[\left(\frac{1}{2} gb \right)^{1/2} x \right] \quad (2.31)$$

这里 $g = u_0 - u_1$, 并满足 $(2+g)^2(1-g) = 27\tilde{d}^2$, 而 u_1, u_0 满足方程

$$2u_0 + u_1 = 2, \quad u_0^2 + 2u_0 u_1 = -2\varepsilon, \quad u_1 u_0^2 = 2\tilde{d}^2, \quad \tilde{d} = \frac{4J^2 m \lambda}{e^{*2} \alpha^2}, \quad \varphi^2 = u_0$$

将式(2.31)代入式(2.28), 可求出电磁场 \vec{A} 的表示式为

$$\vec{A} = -\frac{\vec{J}mc}{e^{*2} \phi_0^2} \cdot \frac{1}{\varphi^2} - \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \theta = \frac{\vec{J}mc}{e^{*2} \phi_0^2} \text{cth}^2 \left[\left(\frac{1}{2} gb \right)^{1/2} x \right] - \frac{\hbar c}{e^*} \nabla \theta$$

对于大块超导体, 相位变化极小。利用 $\vec{H} = \nabla \times A$ 关系, 可求出磁场强度为

$$\vec{H} = \nabla \times \vec{A} = \frac{\bar{j}mc(2gb)^{1/2}}{e^* \phi_0^2 \phi_0^2} \left\{ \text{cth}^3 \left[\left(\frac{1}{2} bg \right)^{1/2} x \right] + \text{cth} \left[\left(\frac{1}{2} gb \right)^{1/2} x \right] \right\} \quad (2.32)$$

由解式(2.31)可知,在电磁场中的超导电子仍是一种孤子,其电子因仍受非线性的电-声子作用而被局域,显示出颗粒的特性。和均匀的、无外场时的解式(2.25)相比,这里孤子的振幅、相位和形状等发生了变化。它明显地受到了电磁场的影响,表现在孤立波的形状在受电磁场的作用后发生了变化。结合在无场作用时的式(2.25)的结果,我们得出一个结论,超导性是由超导电子以孤子形式运动的结果。超导电子无论在有、无电磁场时都在做孤子运动,因此超导电子就是一个孤子。由于任何孤子都具有保持自己形状、波速等不变的运动特征,因此,当在电磁场作用时,这个超导孤子会沿着电场方向,保持其振幅和能量不变地沿着超导体做定向运动,从而便可产生超导永久电流。

将式(2.31)和式(2.32)结合起来,我们就可以说明在第二类超导体中出现的涡旋线结构。为此,把式(2.31)和式(2.32)的图像绘制在图2.6中。由图2.6可见,在 $x \rightarrow 0$ 时, $\vec{H}(x)$ 极大, ϕ 等于零,这表明系统处于正常态;而 $x \rightarrow \infty$ 时, $\phi(x)$ 变得很大,但 $\vec{H}(x)$ 大大减少,这意味着系统处于超导态。这正是在第二类超导体中出现的涡旋线-磁通线结构。于是上述解可以用来解释在第二类超导体中发现的磁通线或涡旋结构的宏观量子效应。这清楚表明,超导体的宏观量子效应是由于超导电子的集体激发和孤子运动产生的。

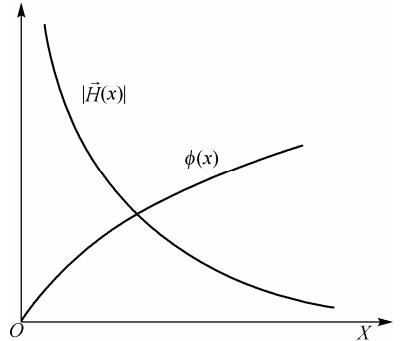


图 2.6 $|\vec{H}|$ 和 $\phi(x)$ 随 x 的变化曲线

利用式(2.28)可求出超导电子-孤子的能量为

$$\begin{aligned} E &= \int_{-\infty}^{+\infty} H dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 + \frac{b}{2} \phi^2 - \frac{b}{4} \phi^4 + B^2/2\phi^2 \right] dx \\ &= \phi_0^2 \left[\left(\frac{2b\phi_0^2}{3} - 1 \right) - \frac{b}{a} \left(1 + \frac{\phi_0^2}{2} \right) \right] - \frac{B^2}{a\phi_{20}} \end{aligned} \quad (2.33)$$

因此孤子的能量仍为常数,但与超导电子之间的相互作用常数和外电磁场有关。这表明电磁场仅改变粒子具有的能量和振幅等的大小,但未改变它的局域粒子特性。

用类似的方法可给出三维情况下式(2.21)至式(2.22)的孤子群。

2.3.4 超导电子在时-空中的动力学特性

以上研究了大块超导体的 GL 方程的解,它们是一些孤子。由此得出超导电子就是一类孤子,它们以孤立波的形式在超导体中运动,若有外电磁场时,可形成超导

永久电流。这是在定态时超导电子的状态和特点。对于与时间相关的超导态，这时 GL 方程中的一种可写成

$$ip \left[\hbar \frac{\partial}{\partial t} - 2ie\Phi(r) \right] \phi = \frac{-1}{2m} \left[\hbar \nabla - \frac{2ie}{c} \bar{A} \right]^2 \phi + (\alpha - \lambda |\phi|^2) \phi \quad (2.34)$$

$$\bar{J} = \sigma \left[\frac{-1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \bar{A} - \nabla \Phi(r) \right] + \frac{ie\hbar}{m} (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) - \frac{4e^2}{mc} \bar{A} |\phi|^2 \quad (2.35)$$

$$\nabla \times \nabla \times \bar{A} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial}{\partial t} \bar{A} - \nabla \Phi \right) + \frac{4\pi \bar{J}}{c} \quad (2.36)$$

式中， σ 是正常态的电导率； p 是任意常数； Φ 是超导体的化学势； α 和 λ 的意义与前面的相同。在弱电磁场，即 \bar{A} 很小，则式 (2.34) 可以写成

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + \frac{\lambda}{p} |\phi|^2 \phi = \left(\frac{\alpha}{p} - 2e\Phi \right) \phi \quad (2.37)$$

这是一个三维的非线性 Schrödinger 方程，其外势场 $V(x) = \frac{\alpha}{p} - 2e\Phi(x)$ 与坐标有关。

这是与式 (2.24) 和式 (2.29) 迥然不同的地方。当 $\Phi = -KEx'$ 时，这里 E 为电场强度， K 是一个常数。在一维系统中它变成

$$i \frac{\partial}{\partial t'} \phi + \frac{\partial^2}{\partial x'^2} \phi + \frac{\lambda}{p} |\phi|^2 \phi = \left[\frac{\alpha}{p} - 2KE(ex') \right] \phi \quad (2.38)$$

式中， $t' = t/\hbar$ ； $x' = (2mp)^{1/2} x/\hbar$ 。如果 ϕ 仍用式 (2.17) 来表示，这时 $\theta = \theta(x', t')$ 是 x' 和 t' 的函数。将式 (2.17) 代入式 (2.38)，可得

$$-\phi \frac{\partial \theta}{\partial t'} + \phi \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right)^2 + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \frac{\lambda}{p} \phi^3 = \left(2eKEx' + \frac{\alpha}{p} \right) \phi \quad (2.39)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial t'} + 2 \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial \theta}{\partial x'} + \phi \frac{\partial^2 \theta}{\partial x'^2} = 0 \quad (2.40)$$

现在令

$$\phi(x', t') = \phi(\xi), \quad \xi = x' - u(t'), \quad u(t') = -2EKEx'(t')^2 + vt' + d \quad (2.41)$$

这里 $u(t')$ 描述了 $\phi(x', t')$ 的加速运动特性。在 $\xi \rightarrow \infty$ 时的边界条件要求 $\phi(\xi)$ 迅速趋近于 0。在这种情况下，式 (2.40) 应写成

$$-\dot{u} \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + 2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \frac{\partial \theta}{\partial \xi} + \phi \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} = 0 \quad (2.42)$$

此处 $\dot{u} = du/dt'$ 。如果 $2 \partial \theta / \partial \xi - \dot{u} \neq 0$ ，则方程式 (2.42) 可写成

$$\varphi^2 = \frac{g(t')}{(\partial\theta/\partial\xi - \dot{u}/2)} \quad \text{或} \quad \frac{\partial\theta}{\partial x'} = \frac{g(t')}{\varphi^2} + \frac{\dot{u}}{2} \quad (2.43)$$

$$\text{对式(2.43)积分, 可得} \quad \theta(x', t') = g(t') \int_0^{x'} \frac{dx''}{\varphi^2} + \frac{\dot{u}}{2} x' + h(t') \quad (2.44)$$

这里 $h(t')$ 是一个未确定的积分常数。从方程式 (2.44) 可得

$$\frac{\partial\theta}{\partial t'} = \dot{g}(t') \int_0^{x'} \frac{dx'}{\varphi^2} - \frac{g\dot{u}}{\varphi^2} + \frac{g\dot{u}}{\varphi^2} \Big|_{x'=0} + \frac{\ddot{u}}{2} x' + \dot{h}(t') \quad (2.45)$$

将式 (2.44) 和式 (2.45) 代入式 (2.39), 可得

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial (x')^2} = \left[\left(2KEEx' + \frac{\alpha}{p} \right) + \frac{\ddot{u}}{2} x' + \dot{h}(t') + \frac{\dot{u}^2}{4} + \dot{g} \int_0^{x'} \frac{dx}{\varphi^2} + \frac{g\dot{u}}{\varphi^2} \Big|_{x'=0} \right] \varphi - \frac{\alpha}{p} \varphi^3 + \frac{g^2}{\varphi^3} \quad (2.46)$$

由于 $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial (x')^2} = \frac{d^2 \varphi}{d\xi^2}$, 则它本身仅是 ξ 的函数。为了让式 (2.45) 的右边也仅是 ξ 的函数,

则必须使 $g(t') = g_0 = \text{constant}$ 。

$$\left(2eKEEx' + \frac{\alpha}{p} \right) + \frac{\ddot{u}}{2} x' + \dot{h}(t') + \frac{\dot{u}^2}{4} + \frac{g\dot{u}}{\varphi^2} \Big|_{x'=0} = \bar{V}(\xi) \quad (2.47)$$

可以假设 $V_0(\xi) = \bar{V}(\xi) - \beta$, 这里 β 是一个任意常数, 于是有

$$2eKEEx' + \frac{\alpha}{p} = V_0(\xi) - \frac{\ddot{u}}{2} x' + \left[\beta - \frac{g\dot{u}}{\varphi^2} \Big|_{x'=0} - \dot{h}(t') - \frac{\dot{u}^2}{4} \right] \quad (2.48)$$

显然, 在这里讨论的问题中 $V_0(\xi) = 0$, 于是式 (2.45) 中方括号内的函数仅是 t' 的函数, 将式 (2.47) 代入式 (2.45), 可得

$$\frac{\partial^2 \tilde{\varphi}}{\partial \xi^2} = \beta \tilde{\varphi} - \frac{\alpha}{p} \tilde{\varphi}^3 + \frac{g_0^2}{\tilde{\varphi}^3} \quad (2.49)$$

此式表明, 当 β 和 g 是常数时, $\tilde{\varphi} = \varphi(\xi)$ 是式 (2.49) 的解。对于较大的 $|\xi|$, 可以假设 $|\tilde{\varphi}| \leq \beta/|\xi|^{1+\Delta}$, 此处 Δ 是一个小常数。为了保证 $d^2 \tilde{\varphi}/d\xi^2$ 和 $\tilde{\varphi}$ 在 $|\xi| \rightarrow \infty$ 时是接近于零的, 唯一的方法是使在式 (2.49) 中相应于 $g_0 = 0$ 的解是稳定的。于是应选择 $g_0 = 0$, 则可得

$$\frac{\partial\theta}{\partial x'} = \frac{\dot{u}}{2} \quad (2.50)$$

于是从式 (2.47) 可得

$$2eKEx' + \frac{\alpha}{p} = -\frac{\ddot{u}}{2}x' + \beta - \dot{h}(t') - \frac{\dot{u}^2}{4}$$

$$h(t') = \left(\beta - \frac{\alpha}{p} - \frac{1}{4}v^2 \right) t' - \frac{4}{3}(EKe)^2(t')^3 + veKE(t')^2 \quad (2.51)$$

将式(2.51)代入式(2.44)和式(2.45), 可得

$$\theta = (-2eKEt' + \frac{1}{2}v)x' + \left(\beta - \frac{\alpha}{p} - \frac{1}{4}v^2 \right) t' - \frac{4}{3}(EKe)^2(t')^3 + veKE(t')^2 \quad (2.52)$$

利用以上结果, 从式(2.49)可得

$$\frac{\partial^2 \tilde{\phi}}{\partial \xi^2} - \beta \tilde{\phi} + \frac{\alpha}{p} \tilde{\phi}^3 = 0 \quad (2.53)$$

当 $\beta > 0$ 时, 方程式(2.53)的解具有如下形式:

$$\tilde{\phi} = \sqrt{\frac{2\beta p}{\alpha}} \operatorname{sech}(\sqrt{\beta} \xi) \quad (2.54)$$

于是可以求出它们的解为

$$\phi(x, t) = \left(\frac{2\beta p}{\alpha} \right)^{1/2} \operatorname{sech} \left\{ \left[\left(\frac{2mp}{\hbar^2} \right)^{1/2} x + \frac{2eKEt^2 - vt - d'}{\hbar} \right] \right\} \cdot$$

$$\exp \left\{ i \left[\left(\frac{-2eKEt}{\hbar} + \frac{1}{2}v \right) \left(\frac{2mp}{\hbar^2} \right)^{1/2} x + \left(\beta - \frac{\alpha}{p} - \frac{v^2}{4} \right) \frac{t}{\hbar} - \frac{4(eKE)^2 t^3}{3\hbar^3} - \frac{v(eKE)t^2}{\hbar} \right] \right\} \quad (2.55)$$

式中,
$$\theta = \left(-2eKEt' + \frac{1}{2}v \right) x' + \left(\beta - \frac{\alpha}{p} - \frac{v^2}{4} \right) t' - \frac{4}{3}(eKE)^2(t')^3 + evKEt'^2 \quad (2.56)$$

这里 c , d 和 β 都是一些常数, 解式(2.55)是一个孤子解, 但它的振幅、速度和频率与前面的孤子相比都发生了变化。可证明这孤子是十分稳定的。其运动速度为 $v_g = 2v - 4eKEt/\hbar$, 即做匀加速运动, 其加速度为 $-4eKE/\hbar$ 。应用这个孤子解可解释超导态的一些非平衡态特征。

若用解式(2.17)和以上的定态的 GL 方程及正常状态时电子满足的波动方程应用于弱连接的超导结时, 再考虑在超导结两边超导体中的超导电子的相位存在的差值和和在两个结的边界的边界条件和它们的连接条件, 便可求出超导结中出现的约瑟夫逊宏观量子效应的基本关系(这些可参考作者的原专著)。由此得出, 在超导体中出现宏观量子效应都可用超导量子波函数式(2.17)和相应的非线性 GL 方程求出。这充分表明 GL 方程或非线性的 Schrödinger 方程能真正表示超导电子的基本特征。又因这些方程都有如式(2.25)或式(2.31)和式(2.55)的孤子解, 而这些孤子都具有确定的能量。因此它们都是具有颗

粒特性的粒子。其粒子局域的原因是由于系统的哈密顿算符或动力学方程中存在的非线性相互作用项 $\lambda|\phi|^2\phi$ 抑制了其色散动能项的缘故，从而使电子被局域化，进而出现了一些宏观量子效应。这个非线性相互作用是由电子与背景的超导体的晶格振动之相互作用产生的。这也使我们的明确非线性相互作用可通过粒子与背景场的相互作用产生。因此，在超导体中微观粒子即电子的局域机制和特征是十分清楚的。其中的非线性相互作用起到了关键作用。因此，这些研究成果为创立非线性量子力学打下了很好的基础。

2.4 量子超流液氦的非线性动力学特性与宏观量子效应

2.4.1 动力学方程及其孤子解

由前面的研究得知，液态 ^4He 在 2.17 K 时会发生相变，即由 He II 变成具有超流性的 He II。它是一种量子流体，具有无黏滞的超流特征。研究表明，这是由于 He 原子在此临界温度下产生的一种玻色-爱因斯坦凝聚状态。此时，玻色子型的氦原子凝聚到动量 $p=0$ 或常数的状态上。根据 $\lambda = h/p$ ，这时每个氦原子的波函数的波长趋于极大，于是在整个空间(实际上是指容器的范围内)出现长程有序，产生超流性。按现代超流理论，这种状态也可用一个宏观波函数 ϕ 来描述。在容器中出现的超流液氦的运动特性，1950 年，Gress 和 Pitaerskii 等人得出了 ϕ 所满足的方程为

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + g|\phi|^2 \phi - \mu' \phi \quad (2.57)$$

这就是描述量子液体运动或玻色凝聚状态的著名的 GP 方程式。实际上，它是一个标准的非线性 Schrödinger 方程，其 m 为氦原子的质量， \hbar 和 μ' 均为常数， g 是非线性作用常数。此方程十分类似于前面讲的超导体的 Ginzburg-Landau (GL) 方程。它也可从理论上严格导出，并被许多人用来研究量子流液体氦的性质。

在一维情况下，假设 $t = t'/\hbar$ ， $x = \sqrt{(2m)/\hbar^2} x'$ ，则式 (2.57) 可变成

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t'} \phi = -\frac{\partial^2}{\partial x'^2} \phi + g|\phi|^2 \phi - \mu' \phi \quad (2.58)$$

若选择 $\mu' = 0$ ，它的解被 Zakharov 和 Shabat 用反散射方法很早求出，庞小峰用另一个方法求出，现将它表示为

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{(v_e^2 - 2v_0v_e)}{2|g|}} \operatorname{sech} \left\{ \frac{\sqrt{v_e^2 - 2v_e v_0}}{4} (x' - v_e t') \right\} \exp i \left[\frac{v_e}{2} (x' - v_e t') \right] \quad (2.59)$$

在 $\mu \neq 0$ 时，式 (2.58) 的解就很难求得了。按照前面的方法，此时设

$$\phi = \varphi(x', t') e^{i\theta(x', t')} \quad (2.60)$$

将式 (2.60) 代入式 (2.58)，可得

$$-\varphi \frac{\partial \theta}{\partial t'} - \varphi \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right)^2 + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} - g\varphi^3 = \mu' \varphi \quad (2.61)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t'} + 2 \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \frac{\partial \theta}{\partial x'} + \varphi \frac{\partial^2 \theta}{\partial x'^2} = 0 \quad (2.62)$$

$$\text{又假定} \quad \varphi(x', t') = \tilde{\varphi}(\xi), \quad \xi = x' - u(t'), \quad u(t') = v_e t' + d \quad (2.63)$$

这里 $u(t')$ 描述了 $\varphi(x', t')$ 的运动规律。 $\tilde{\varphi}(\xi)$ 满足自然边界条件，即当 $\xi \rightarrow \infty$ 时， $\tilde{\varphi}(\xi)$ 迅速趋于零。按式 (2.39) ~ 式 (2.52) 的方法，可求出上述方程的解。在 $\beta > 0$ 时，解表示为

$$\tilde{\varphi} = \sqrt{2\beta/|g|} \operatorname{sech}(\sqrt{\beta}\xi)$$

这里 β 由方程 $-\mu' = V_0(\xi) - \frac{\ddot{u}}{2} x' + \left[\beta - (q_0 \dot{u} / \tilde{\varphi}^2) \right]_{x=0} - \dot{h}(t') - \frac{\dot{u}^2}{4}$ 决定，其中 $V_0(\xi) = 0$ ， q_0 是积分常数。若 $g < 0$ 时，其解为

$$\phi = \sqrt{\frac{2\beta}{|g|}} \operatorname{sech} \left\{ \sqrt{\beta} (x' - v_e(t' - t'_0)) \right\} \exp i \left\{ \frac{v_e}{2} x' - \left(\beta + \frac{v_e^2}{4} - \mu' \right) t' \right\} \quad (2.64)$$

可以验证式 (2.64) 确实是方程式 (2.58) 或式 (2.57) 的解。同时还可以证明这个孤子解是十分稳定的。

从以上研究可知，描述超流量子液氦的 GP 方程式 (2.57) 的解式 (2.59)，式 (2.64) 是波包型的非拓扑性孤子，即超流氦原子是在做孤子运动。式 (2.59) 和式 (2.64) 的区别仅是孤立波的振幅和传播速度 (群速度和相速度) 不同。它们是由式 (2.40) 中的非线性自相互作用产生的两个不同的基态 (能量最小的态) 阻止和抑制了粒子能量的色散效应，从而形成了一个稳定的孤子，则超流氦原子被局域。这个结论十分重要。在正常态时，氦原子是色散的，当在 2.17 K 时凝聚为超流量子液体。此时氦原子受非

线性自相互作用而被局域成一个孤子。由于孤子具有能保持能量和振幅不变运动的特点，才使量子液体出现超流特点。因此可以说，超流性是由氦原子被局域后做孤子运动引起的。

2.4.2 非线性相互作用将氦原子局域为孤子的特点

对于式(2.64)中的孤子，可定义一个波矢 $k = \frac{\partial \theta}{\partial x'} = \frac{v_c}{2}$ 和频率 $\omega = -\frac{\partial \theta}{\partial t'} = -\left(\beta - \frac{v_c^2}{4} + \mu\right) = -\beta - \mu + k^2$ 。很明显，在非均匀介质中形成具有粒子性的波包型孤子也遵从经典的哈密顿方程，事实上在这种情况下哈密顿方程可写为

$$\frac{dk}{dt'} = -\frac{\partial \omega}{\partial x'} \bigg|_k \quad \text{和} \quad \frac{dx'}{dt'} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \quad (2.65)$$

$$\text{在 } \frac{dk}{dt'} = 0 \text{ 时, 有} \quad v_g = \frac{dx'}{dt'} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = 2k = v_c$$

这就是说，对于非线性波来讲，频率 ω 仍可保持哈密顿函数的意义。因而有

$$\frac{d\omega}{dt'} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \bigg|_{x'} \frac{dk}{dt'} + \frac{\partial \omega}{\partial x'} \bigg|_{x'} \frac{dx'}{dt'} = 0 \quad (2.66)$$

由此得到式(2.65)。对于由式(2.64)描述的超流氦原子，则有

$$v_g = v_c, \quad \frac{dk}{dt'} = 0$$

于是得到的这种孤子的频率不等于零，但是它与 t' 和 x' 无关，其群速度 v_g 为常数，加速度等于零，即在此种情况下形成的孤子在做匀速运动。由于每个超流氦原子都能保持匀速流动，从而使整个氦量子液体具有超流性。这再次说明，超流性就是超流氦原子以孤子形式做匀速运动的结果。因此，这一研究使我们寻找到了超流性的本质。

再由式(2.62)，还可以得出

$$\frac{\partial}{\partial t'}(\varphi^2) + \frac{\partial}{\partial x'} \left[\varphi^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right) \right] = 0$$

如果把 φ^2 视做流体的密度，而 $\frac{\partial \theta}{\partial x'}$ 是它在 x' 点的流速度，则上式就是我们通常所说的流体的连续性方程。这也是超流量子液体的连续性方程。因此，超流氦原子具有宏观粒子特性。

从式(2.47)不难求出这类孤子的质量为

$$M = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx' = \frac{4}{gh} \sqrt{m\beta} = \text{constant}$$

其孤子的能量为

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left| \frac{\partial \phi}{\partial x'} \right|^2 + \frac{1}{2} g |\phi|^4 - \mu |\phi|^2 \right] dx' = \left(\frac{1}{2} v_c^2 - \mu \right) M + \frac{4\sqrt{2m\beta}}{3gh} (4 + \beta) \quad (2.67)$$

式中，第一项是孤子的动能；第二项是束缚能；第三项是相互作用能，其能量也是一个常数。由此，超流氦原子的颗粒特性被显示出来。

2.4.3 在超流液氦量子体系中观察到的宏观量子效应的解释及环流量子化

若用宏观波函数式(2.60)和式(2.64)的相位 $\theta(x, t)$ 来表示超流速度，则有 $v_s = (\hbar/m)\nabla\theta$ 。应用前面求得的 θ 值，可知 v_s 正比于 v_c ，即为 $v_s = \frac{\hbar}{2m} v_c$ ， v_c 为孤子的速度。这说明孤子的运动导致了超流运动，则在超流相中出现的涡旋线就是液氦原子做孤子运动引起的。显然由 v_s 的表示式可求出围绕一个闭合曲线的相位差，即环流量为，

$$\Delta\theta(r) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \oint_{\Gamma} v_s dr \quad (2.68)$$

如果积分回路是一个多连通区域，或包围有一个涡旋线，则 $\Delta\theta(r) \neq 0$ 。如果

$\phi(r) \neq 0$ ，并且是单值的，则可得到

$$\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \oint_{\Gamma} v_s d\vec{r} = 2\pi n \quad \text{即} \quad \oint_{\Gamma} v_s d\vec{r} = n \frac{h}{\sqrt{2m}} \quad (2.69)$$

这里 n 是整数。此式表示只要做超流运动的液氦的速度超过某一临界速度时，它的环流会产生旋涡，而这些涡旋的环流量(或涡旋线的能量)是量子化的，并且是 $h/\sqrt{2m}$ 的整数倍。这一现象在 1963 年和最近几年人们在测量涡旋线的能量时被实验证实，这是一种宏观量子效应。于是，可用以上理论和超流液氦原子在非线性自相互作用下形成的孤子运动来解释超流的宏观量子效应。这不但肯定了超流的宏观量子效应是一种非线性量子效应，而且也肯定它是由非线性相互作用下氦原子做孤子运动所产生的结果。但若超流液氦无环流，即 $\nabla \times \vec{v}_s = \frac{\hbar}{m} \nabla \times \nabla \theta = 0$ 。同时，在超流液氦流过一个直径逐渐变小的管子时，粗管处(流速小)和窄管处(流速大)的压强是一样

的。这和普通流体具有的性质极不相同，并被实验所证实。另外，从求出的宏观波函数式(2.60)或式(2.64)具有在 $\xi \rightarrow \infty$ 时， $\phi(\xi) \rightarrow 0$ ；或 $x \rightarrow \infty$ 时， $\phi(x, t) \rightarrow 0$ 的特点，即在边界上消失，于是可知超流密度 $\rho_s (= \alpha |\phi|^2)$ 也在边界上趋于零。1970 年人们从实验上测得 ρ_s 在几个原子层厚度内从大样品中的值下降到零，从而证实了上面的理论结果。总之，发生在超流液氦中的许多宏观量子特征和它的特征可用以上建立的理论和结果加以说明。由此，便证实了非线性相互作用的客观存在和作用效果。

由以上研究使我看到，氦原子在非线性相互作用下，其运动方程不再是线性 Schrödinger 方程描述的扩展态，而是非线性 Schrödinger 方程式(2.57)描述的孤子态和玻色凝聚的超流态。此时粒子被局域，具有确定的能量和质量，并以不变的速度做匀速运动，显示出的波-粒二重性。这些实验和理论为建立非线性量子力学打下了坚实的基础。

习题

说明：以下有些习题(*)较难做，请根据实际情况，选择较简单的完成。

1. 具体分析和描述研究波色凝聚安定现象的现代理论的特点，阐述此现象的非线性特点。
2. 具体分析低温超导的 BCS 理论的非线性特性。
3. 用非线性动力学 GL 方程组：

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\nabla^2 - \frac{ie^*}{ch} \vec{A} \right) \phi - \alpha \phi + 2\lambda \phi^3 = 0$$

$$\vec{J} = \frac{e^* \hbar}{2im} \left(\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^* \right) - \frac{e^{*2}}{mc} |\phi|^2 \vec{A} = 0$$

求解出 S-N 超导结产生的邻近效应。

- *4. 求解一个简化的、具有耗散特性的 Ginzburg-Candau (GL) 方程：

$$r \frac{\partial}{\partial t} \phi = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + \alpha \phi - \lambda |\phi|^2 \phi$$

式中， r 和 α 是一个实数。

第 3 章 非线性量子力学的基本原理和理论

本章在宏观量子力学本质研究的基础上，提出了非线性量子力学的基本原理和涉及到的一些基本理论。这些基本理论包括非线性叠加原理、傅里叶变换原理、微扰理论、量子化理论、相对论性理论和本征值理论。并且阐明了所建立的非线性量子力学是量子力学发展的必然结果，进一步论证了该理论的正确性和普适性。

3.1 宏观量子效应的启示

在第 1 章中，描述了量子力学存在的许多困难，对它的一些基本假设存在长时期的争论，至今无法解决。同时，它的动力学方程和哈密顿量与粒子的状态波函数无关，并且未考虑粒子之间或粒子与背景场中的非线性相互作用，从而无法抑制动能项的色散效应。于是微观粒子不能局域，仅能以波形式运动，这与颗粒属性相佐。说明非常有必要发展量子力学。

在第 2 章中，详细研究了宏观量子效应、超导和超流的特性和本质。得知，组成该系统的微观粒子在特定条件下由于体系的非线性作用的增强，产生了系统的对称性自发破缺，引发了集体激发，形成了玻色凝聚和自发相干状态。同时，应用超导和超流理论，研究了在这些状态下粒子的运动特性和变化规律。从中看到，在这些现象中，非线性作用起了关键作用。换句话说，这些宏观量子效应，超导和超流现象紧密相关于粒子与粒子或粒子与背景场(晶格)之间的非线性相互作用，它们的本质就是一种非线性量子效应。但这并不意味着有非线性作用的存在就必然会产生超导、超流和宏观量子效应。毕竟，后者是一种低温和在特殊材料中产生的现象。只有这些条件充分被满足，并和这种非线性相互作用一起在这些材料中出现时才会产生这些现象。同时，也发现若非线性相互作用的产生机理不同，则由它所产生的效应和特性也不同。这些实验结果和理论研究的成果为发展量子力学提供了以下启示和收获。

(1) 宏观量子效应，超导与超流是一个非线性量子效应，它在客观世界中真实和广泛存在。在其中，量子间的非线性相互作用使物质的特性和微观粒子的性质改变。因此，粒子的局域特性紧密相关于非线性相互作用。在超导和超流体中的电子和氦原子在非线性的相互作用的影响下，成为具有粒子性的局域孤子就是一个最好的例证。

(2) 宏观量子效应不同于微观量子效应。量子力学能描述微观量子效应，但对宏观量子效应失效，即不能从量子力学的哈密顿量和线性 **Schrödinger** 方程导出超导、超流性和宏观量子效应。为什么原有量子力学不能描述宏观量子效应呢？这是因为它

未考虑粒子与粒子、粒子与背景场之间的非线性相互作用。这意味着发展量子力学必须把线性量子力学没有考虑到的非线性相互作用概括到系统的动力学方程和哈密顿量中,去抑制动能的色散作用,从而使微观粒子局域为具有波-粒二象性的客体。

(3) 从现有的 BCS 超导理论和超流理论可知,在超导和超流及宏观量子效应中出现的这种非线性相互作用分别来源于电-声子相互作用和氦原子之间的自相互作用。因此,BCS 超导理论和超流理论是一种非线性理论。这些理论的一个基本特点就是系统的哈密顿算符和自由能及动力学方程(如 GL 方程和 GP 方程)是粒子状态波函数的非线性函数。至此,系统或粒子的哈密顿算符或能量与它的状态紧密相关。这些都与原有量子力学存在本质的不同。于是微观粒子的性质发生改变。当有效势能提供两个或多个极小势阱时,微观粒子会自动“自陷”为一个局域的孤子,使自己的能量不再弥散,而是聚集成一个有确定大小、能量与有效质量的粒子。在这种情况下,体系的对称性自发破缺和能量降低所产生的集体激发出现相干性,并凝聚到具有较低动量的状态上。由此可以肯定,非线性相互作用定能改变粒子的状态和性质,使粒子具有局域的特性。因此,量子力学的发展方向就是考虑这些非线性相互作用,建立非线性量子力学。

但又如何能建立起非线性量子力学呢?从超导和超流理论不同于线性量子力学之中可寻找到建立新理论的方法,即(a)像超导和超流理论一样,把线性量子力学未计入的重要非线性相互作用加进系统的哈密顿算符和动力学方程中,这就必须突破线性量子力学的哈密顿算符与粒子状态无关的假设。从而使系统的哈密顿算符或拉格朗日函数或自由能可以概括系统的这些非线性相互作用,并和粒子的状态波函数 $\phi(\vec{r}, t)$ 相关,就像式(2.1)、式(2.2)、式(2.18)和式(2.19)那样。但由于时空对称性的要求,至少必须把基本项 $|\phi|^2 |\phi|^*$ 加入到系统的哈密顿量或自由能中;把 $|\phi|^2 \phi$ 加进原来的 Schrödinger 方程中。研究表明,这种非线性相互作用在包括原子在内的任何物理系统中都存在,它的产生机理将在本章末和第6章中详细阐述。(b)在线性量子力学中,微观粒子的动力学方程在非相对论时是线性 Schrödinger 方程,在相对论时是线性的 Klein-Gordon 方程和狄拉克方程。则所发展的量子力学只能选择非线性 Schrödinger 方程和非线性 Klein-Gordon 方程,而不能选择其他形式的动力学方程。这是因为新的量子力学不能否定和抛弃原有的量子力学,另起炉灶,仅能在原有量子力学的基础上建立起来。根据这种发展思路,在系统的非线性相互作用非常之弱时能使非线性量子力学退化为原有的量子力学的动力学方程,以显示两种理论的自洽性,使之符合科学发展的规律。具体讲,新理论的动力学方程应当类似于 GL 或 GP 方程式(2.20)或式(2.21)或式(2.38)或式(2.57)等,使它们具有孤子解,以此去表示出微观粒子的局域和粒子特性。这是因为从这些动力学方程已经得到了超导电子和超流液氦原子等微观粒子,通过这些动力学机制使自身局域为一个孤子。

有了以上这些知识和结果，并把它们有机结合起来，即把宏观量子效应与非线性相互作用和孤子运动结合起来，便可以建立起非线性量子力学的基本原理。在这些基本原理的基础上，结合现代孤子理论，庞小峰建立起了非线性量子力学的完整理论。

3.2 非线性量子力学的基本原理

3.2.1 非线性量子力学的基本原理

庞小峰在研究宏观量子效应、非线性相互作用和孤子运动的关系以及上述超导和超流理论的基础上，在 20 世纪 80 年代提出的非线性量子力学的基本原理，其内容如下：

(1) 非线性量子系统中的微观粒子的状态用波函数

$$\phi(\vec{r}, t) = \varphi(\vec{r}, t) e^{i\theta(\vec{r}, t)} \quad (3.1)$$

来描述。这里波函数的振幅 $\varphi(\vec{r}, t)$ 和相位 $\theta(\vec{r}, t)$ 都是空间和时间的函数，满足特定的方程。

(2) 波函数 $\phi(\vec{r}, t)$ 在非相对论情况下满足广义的非线性 Schrödinger 方程，即

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \mp b |\phi|^2 \phi + V(\vec{r}, t) \phi + A(\phi) \quad (3.2)$$

$$\text{或} \quad \mu \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi \mp b |\phi|^2 \phi + V(\vec{r}, t) \phi + A(\phi) \quad (3.3)$$

式中， μ 是一个复数； V 是外势场； A 是常量或是 ϕ 的函数； b 是非线性相互作用系数。

在相对论的情况下，满足非线性 Klein-Gordon 方程如广义的 SG 方程或 ϕ^4 场方程，即

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} = \lambda \sin \phi + \gamma \frac{\partial \phi}{\partial t} + A(\phi) \quad (3.4)$$

$$\text{或} \quad \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x_i^2} \mp \alpha \phi \pm \lambda |\phi|^2 \phi = A(\phi) \quad i=1, 2, 3 \quad (3.5)$$

式中， α 是相互作用常数； λ 是非线性相互作用系数； A 是常数或是 ϕ 的函数。

这就是非线性量子力学的两点基本假设，跟线性量子力学的几点假设是截然不同的。

3.2.2 非线性量子力学基本原理的特点

(1) 非线性量子力学系统中的微观粒子的波函数式(3.1)的绝对值的平方 $|\phi(\vec{r}, t)|^2 = \rho(\vec{r}, t)$ 不再表示该粒子在时空中的 \vec{r} 和 t 处出现的概率,而是表示在该点的粒子的密度。因此,概率的概念或用概率来表示粒子性的解释在非线性量子力学中已失效了或不存在。

(2) 在非线性量子力学中也存在算符。如线性算符和非线性算符,但能量算符与“ $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ ”算符无关。因此在非线性量子力学中,许多算符也失去了原来量子力学中的关系或意义,并出现多种不同的非线性算符。

$$\text{例如式(3.2)可表示为} \quad i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = \hat{H}(\phi)\phi \quad (3.6)$$

则现在的准哈密顿算符 $\hat{H}(\phi)$ 就是 ϕ 的非线性算符,即

$$\hat{H}(\phi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - b|\phi|^2 + V(\vec{r}, t) \quad (3.7)$$

如果引用 Lax 表示,则式(3.6)可表示为

$$\phi_t = K(\phi) \quad \phi = \phi(\vec{r}, t)$$

$K(\phi)$ 就是一个非线性算符或遗传算符(hereditary operator)。而从平移群的产生子产生出来的,并能产生矢量场 $K(\phi)$ 的 $\Phi(\phi)$,在一维情况下,可表示为

$$K(\phi) = \Phi(\phi)\phi_x$$

式中, $\Phi(\phi)$ 为非线性的循环算符(therecursion operator)。相对于一般的非线性 Schrödinger 方程,对应于式(3.6)的 Φ 可写成

$$\Phi(\phi) = -iD + 4i\phi D^{-1} \text{Re}(\bar{\phi})$$

式中, $\bar{\phi}$ 是 ϕ 的复数共轭函数; D 表示对 x 的导数,具有性质

$$D^{-1}f(x) = \int_{-\infty}^x f(\xi)d\xi$$

由于遗传特性,可得到矢量场

$$K_n(\phi) = \Phi(\phi)^n \phi_x \quad n = 0, 1$$

循环算符 $\Phi(\phi)$ 的本征态 ψ 的运动方程可写成

$$\psi_t = K'(\phi)[\psi]$$

式中, $K'(\phi)$ 表示 $K(\phi)$ 相对于 ϕ 的变分导数, 可写成

$$K'(\phi)[\psi] = \left. \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} K'(\phi + \varepsilon \psi)$$

于是可得到循环算符随时间的变化方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \Phi(\phi) = K'(\phi) \Phi(\phi) - \Phi(\phi) K'(\phi) = [K'(\phi), \Phi(\phi)] \quad (3.8)$$

该方程类似于线性量子力学中的海森矩阵运动方程, 但这里 $K'(\phi)$ 和 $\Phi(\phi)$ 都是非线性算符。

(3) 在非线性量子力学中也存在力学量的算符在特定态上求“平均值”的问题, 但其结果并不像线性量子力学中那样是表示力学量的所有可能值, 而是具有一个确定值。一般表示了质心的相应值。因此力学量对某态的平均值的解释在非线性量子力学中已经发生了本质性的变化。

(4) 相应于式 (3.2) 的系统的哈密顿算符在 $A(\phi) = 0$ 时可由式 (3.6) 中推出, 即式 (3.7)。因此它与粒子的状态波函数有关, 并且是 $\phi(\vec{r}, t)$ 的非线性函数。式 (3.2) 相对应的系统的哈密顿量密度为

$$H(\phi) = + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \phi|^2 - \frac{b}{2} |\phi|^2 |\phi^*|^2 + V(\vec{r}, t) |\phi|^2 \quad (3.9)$$

相应的系统的拉格朗日密度函数为

$$L(\phi) = \frac{i\hbar}{2} (\phi^* \phi_t - \phi \phi_t^*) - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \phi \cdot \nabla \phi^*) - V(\vec{r}, t) \phi^* \phi + \frac{1}{2} b (\phi^* \phi)^2 \quad (3.10)$$

其中系统的哈密顿量和拉格朗日函数分别为

$$H = \int H'(\phi) d\mathbf{z} \quad \text{和} \quad L = \int L'(\phi) d\mathbf{z}$$

这里 $H' = H$, $L' = L$ 。因此, 不论哈密顿算符或哈密顿量还是拉格朗日函数都是粒子状态波函数 ϕ 的非线性函数, 从而突破了原有量子力学中哈密顿算符与粒子状态波函数无关的基本假设。这是非线性量子力学不同于线性量子力学的最根本点。

(5) 在式 (3.1) 的微观粒子的状态波函数的振幅 $\phi(\vec{r}, t)$ 和相位 $\theta(\vec{r}, t)$ 都具有实际的物理意义, 满足不同的方程。如果把式 (3.1) 代入式 (3.2) 中, 则在一维情况下可得到 $\phi(\vec{r}, t)$ 和 $\theta(\vec{r}, t)$ 的联立方程组为

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} - \frac{\partial \theta}{\partial t'} \varphi - \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right)^2 \varphi + b \varphi^3 = V(x', t') \varphi \quad (3.11)$$

$$\varphi \frac{\partial^2 \theta}{\partial x'^2} + 2 \frac{\partial \varphi}{\partial x'} \frac{\partial \theta}{\partial x'} + \frac{\partial \varphi}{\partial t'} = 0 \quad (3.12)$$

式中, $x' = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} x$; $t' = t/\hbar$ 。从而把一个难以求解的非线性 Schrödinger 方程简化为两个易求解的方程组, 可使问题易求解。在这种情况下, 往往是先求解式(3.12)得出 $\partial \theta / \partial x'$, 再将它代入式(3.11), 所得到的方程就易于求解了。但对于大块均匀的一维物体, $\theta(x', t')$ 和 x' 与 t' 无关, 从式(3.12)得到 $\varphi(x', t')$ 与 t' 无关。则由式(3.11)得到 $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} + b \varphi^3 - V(x') \varphi = 0$ 。这是一个定态非线性 Schrödinger 方程, 与在第2章中遇到的定态 GL 方程式类似。

(6) 在式(3.2)~式(3.5)的动力学方程都存在具有确定能量的孤子解。因此, $\phi(\vec{r}, t)$ 表示一个孤子。根据孤子的一些特性, 由 $\phi(\vec{r}, t)$ 表示的微观粒子一定既有粒子性, 又具有波动性, 即具有波-粒二象性。因此, 它不是线性量子力学中的概率波或德布罗意波。由上一章的研究得知, 该微观粒子的位置和动量是确定的。

(7) 在非线性量子力学中也存在定态问题。对于一个定态, 则定态波函数可写成

$$\phi(\vec{r}, t) = \varphi'(\vec{r}) \exp(-iEt/\hbar) \quad (3.13)$$

将其代入 $A(\phi) = 0$ 的式(3.2), 则可得

$$E\varphi' = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi'(r) + V(r)\varphi'(r) - b|\varphi'|^2 \varphi' \quad (3.14)$$

设 $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$, 则粒子的定态方程变为 $\hat{H}(\varphi')\varphi' = E\varphi'$,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) - b|\varphi'|^2 = \hat{H}_0 - b\hat{\rho}(\vec{r}) \quad (3.15)$$

这里 $\rho = |\varphi'|^2$ 为微观粒子的质量密度。因此, 具有非线性相互作用的微观粒子所具有的能量低于线性量子力学所描述的微观粒子的能量。于是, 前者由于受非线性作用而减少了能量, 从而被束缚或被局域为一个具有颗粒性质的粒子而处于一种稳定状态中。

(8) 由非线性 Schrödinger 方程式(3.2)对应哈密顿量 H [式(3.9)]或拉格朗日函数 L [式(3.10)]具有时空对称性, 即做 $t \rightarrow -t$ 和 $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ 或 $x \rightarrow -x$, $y \rightarrow -y$ 和 $z \rightarrow -z$ 的变换时是不变的。同时它们具有 $U(1)$ 的对称性, 即在 $\phi(\vec{r}, t) \rightarrow \phi'(\vec{r}, t) = e^{-iQ\theta} \phi(\vec{r}, t)$ 的变

换下，它是不变的，这里 Q 是电荷， θ 是任意常相位。如对于一维情况，由于哈密顿量 H 中的每一项都是多个 ϕ_i 的乘积，则便有关系， $\phi'_1(\vec{r}_1, t)\phi'_2(\vec{r}_2, t)\cdots\phi'_n(\vec{r}_n, t) = e^{-i(Q_1+Q_2+\cdots+Q_n)\theta}\phi_1(\vec{r}_1, t)\phi_2(\vec{r}_2, t)\cdots\phi_n(\vec{r}_n, t)$ 存在。由于这种变换下系统的总电荷不变(即总电荷守恒)，同时应要求系统的哈密顿量 H 是中性的，则 $(Q_1+Q_2+Q_3+\cdots+Q_n)$ 必须为 0。又因 θ 与 x 无关，则有 $\nabla\phi_i \rightarrow e^{i\theta Q}\nabla\phi_i$ 关系成立。于是 H 和 L 中的每一项在上述变换下都会保持不变，则 H 和 L 本身也不会变化，而具有 $U(1)$ 不变性。

3.3 非线性量子力学的叠加原理和傅里叶变换

像线性量子力学一样，非线性量子力学也有自己独特的基本理论基础，这些理论在对微观粒子的特性进行分析和研究时必须采用。它包括：(1) 非线性叠加原理和贝克隆变换；(2) 非线性傅里叶变换理论；(3) 量子化原理；(4) 微扰理论；(5) 相对性理论；(6) 相互作用与粒子散射理论和(7) 本征值理论等。一般来讲，上述基本理论是相当复杂的，这里仅结合到孤子物理理论来研究这些理论，本节先讨论前两个问题，其相互作用和散射理论在第 5 章中详细介绍。

3.3.1 非线性叠加原理和相应的贝克隆变换

很显然，在非线性量子力学中的微观粒子所满足的叠加原理应不同于线性量子力学中线性波的叠加原理。后者常表示为 $\psi(\vec{r}, t) = \psi_1(\vec{r}, t) + \psi_2(\vec{r}, t)$ ，即粒子的任意两个(或多个)态的叠加态 $\psi(\vec{r}, t)$ 仍表示了该粒子的一个状态。同时，由于非线性作用形式和性质不同，所形成的微观粒子的孤立波的叠加规则也不一样，并且十分复杂。

Konopelchenko 推导出了像非线性 Schrödinger 方程等可积性的非线性方程的非线性叠加原理。为了求出它们对应的叠加公式，根据 Lax 方法 Konopelchenko 将粒子的波函数满足的非线性动力学方程所对应的线性方程可表示为

$$\frac{\partial}{\partial x'} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = i\lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & q(x', t') \\ r(x', t') & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

$$\text{它可简写成} \quad \frac{\partial P(x', t')}{\partial t'} = 2i\Omega(\Lambda^+)AP \quad (3.17)$$

$$\text{式中,} \quad P = \begin{pmatrix} 0 & q \\ r & 0 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$\Omega(L^+)$ 是任意一个 meromorphic 函数； λ 是一个常数；

$$L^+ = -\frac{1}{2}iA\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{1}{2}i\left[P(x'), \int_{-\infty}^{x'} [P(y), A^*] dy\right]$$

$\psi(x', t') = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ 是一个在反散射方法中所使用过的二分量的 Jost 函数, 而 $q(x', t')$

和 $r(x', t')$ 是相关于满足非线性 Schrödinger 方程的微观粒子的两个不同状态的波函数。而我们的目的就是求出满足此方程的这些波函数的叠加公式。关于式 (3.17) 的贝克隆变换 (BT) 的无限维群 P 到 P' 的变化是由以下变换组成的, 即

$$\sum_{i=1,2} B_i(\Lambda^+)(H'_i P' - P H'_i) = 0 \quad (3.18)$$

式中,

$$H'_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad H'_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$B_1(\Lambda^+)$ 和 $B_2(\Lambda^+)$ 是任意的完全函数 (entire function), 算符 Λ^+ 满足

$$\begin{aligned} \Lambda^+ \phi = & -\frac{i}{2} A \frac{\partial \phi}{\partial x'} - \frac{i}{2} \int_{-\infty}^{x'} [A \phi(y) P'(y) - P(y) A \phi(y)] P'(x') dy + \\ & \frac{1}{2} P(x') \int_{-\infty}^{x'} [A \phi(y) P'(y) - P(y) A \phi(y)] dy \end{aligned}$$

现在考虑一个任意分立的 BT 式 (3.18), 即令

$$B_1(\Lambda^+) = \prod_{i=1}^{n_1} (\Lambda^+ - \lambda_i), \quad B_2(\Lambda^+) = \prod_{k=1}^{n_2} (\Lambda^+ - \mu_k)$$

式中, λ_i 和 μ_k 是任意常数; n_1, n_2 是任意整数。对于一个任意分立的 BT, 其中的 B 可写成

$$B = \prod_{k=1}^{n_2} B_{\mu k}^{(2)} \prod_{i=1}^{n_1} B_{\lambda i}^{(1)} \quad (3.19)$$

式中, $B_{\lambda}^{(1)}$ 和 $B_{\mu}^{(2)}$ 是任意子贝克隆变换 (EBT), $\text{EBT} B_{\lambda}^{(1)}$ 是 $B_1 = \Lambda^+ - \lambda$, $B_2 = 1$ (λ 是任意常数) 时的 BT 式 (3.18), $\text{EBT} B_{\mu}^{(2)}$ 是 $B_1 = 1, B_2 = \Lambda^+ - \mu$ (μ 是常数) 时的 BT 式 (3.18)。而 EBT 的明显表示式为

$$B_{\lambda}^{(1)}(P - P') : i \frac{\partial q'}{\partial x'} - \frac{1}{2} q'^2 r + 2\lambda q' + 2q = 0 \quad (3.20a)$$

$$i \frac{\partial r}{\partial x'} + \frac{1}{2} r^2 q' - 2\lambda r - 2r' = 0 \quad (3.20b)$$

$$B_{\mu}^{(2)}(P - P') : i \frac{\partial q}{\partial x'} - \frac{1}{2} q^2 r + 2\mu q + 2q' = 0 \quad (3.21a)$$

$$i \frac{\partial r'}{\partial x'} + \frac{1}{2} r'^2 q - 2\mu r' - 2r = 0 \quad (3.21b)$$

EBT $B_\lambda^{(1)}$ 和 $B_\mu^{(2)}$ 可以相互变换, 即

$$B_\lambda^{(1)} B_\mu^{(2)} = B_\mu^{(2)} B_\lambda^{(1)}$$

并有

$$B_\mu^{(2)} B_\lambda^{(1)} = B_\lambda^{(1)} B_\mu^{(2)} = 1$$

现考虑式(3.17)的4个确定解, 它们以图3.1的形式相互相关, 表示 EBT 的 $B_\lambda^{(1)}$ 和 $B_\mu^{(2)}$ 的可变换性。使用式(3.21)和式(3.20), 从图3.1 可以得到以下态的叠加关系式

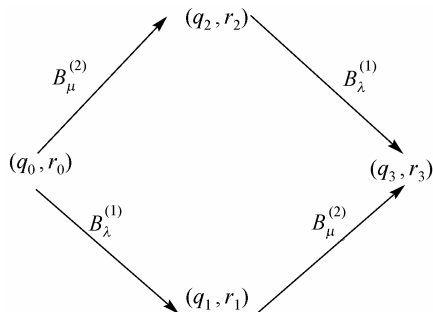


图 3.1 子贝克隆变换关系

$$q_3 = q_0 + 2(\lambda - \mu)/(r_2/2 + 2/q_1) \quad (3.22a)$$

$$r_3 = r_0 + 2(\mu - \lambda)/(q_1/2 + 2/r_2) \quad (3.22b)$$

因此, 如果知道式(3.17)的三个解 (q_0, r_0) , (q_1, r_1) 和 (q_2, r_2) , 则可从式(3.22)求出第4个解 (q_3, r_3) 。因此, 式(3.22)就是相应于非线性 Schrödinger 方程式(3.17)的非线性叠加公式。它具有普遍性, 对一切可积的非线性方程都适用。

若使用式(3.22)还可用纯代数方法求出式(3.17)的无限个解。若设 $P_{00} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, 则可用 BT 式(3.19)作用于其上, 便可得到整个系统的解。如图 3.2 中的系列解, 可写成

$$P_{(n_1, n_2)} = \prod_{k=1}^{n_2} B_{\mu k}^{(2)} \prod_{i=1}^{n_1} B_{\lambda i}^{(1)} P_{(00)} \quad (3.23)$$

其解 $P_{(0n)}$ 和 $P_{(n0)}$ 便可以从式(3.20)和式(3.22)求出, 它有

$$q_{(0n)} = 0, \quad r_{(0n)} = \sum_{l=1}^n \exp[-2i\Omega(\mu_l)t' - 2i\mu_l(x' - \bar{x}_{0l}')] \quad (3.23a)$$

$$q_{(n0)} = \sum_{l=0}^n \exp[2i\Omega(\lambda_l)t' + 2i\lambda_l(x' - x'_{0l})], \quad r_{(n0)} = 0 \quad (3.23b)$$

式中, x_{0l} 和 \bar{x}_{0l} 是任意常数。则相对于式(3.23)的式(3.22)的非线性叠加公式可写成

$$q_{(n_1+1, n_2+1)} = q_{(n_1, n_2)} + 2(\lambda - \mu)/(r_{(n_1, n_2+1)}/2 + 2/q_{(n_1+1, n_2)}) \quad (3.24a)$$

$$r_{(n_1+1, n_2+1)} = r_{(n_1, n_2)} + 2(\mu - \lambda)/(q_{(n_1+1, n_2)}/2 + 2/r_{(n_1, n_2+1)}) \quad (3.24b)$$

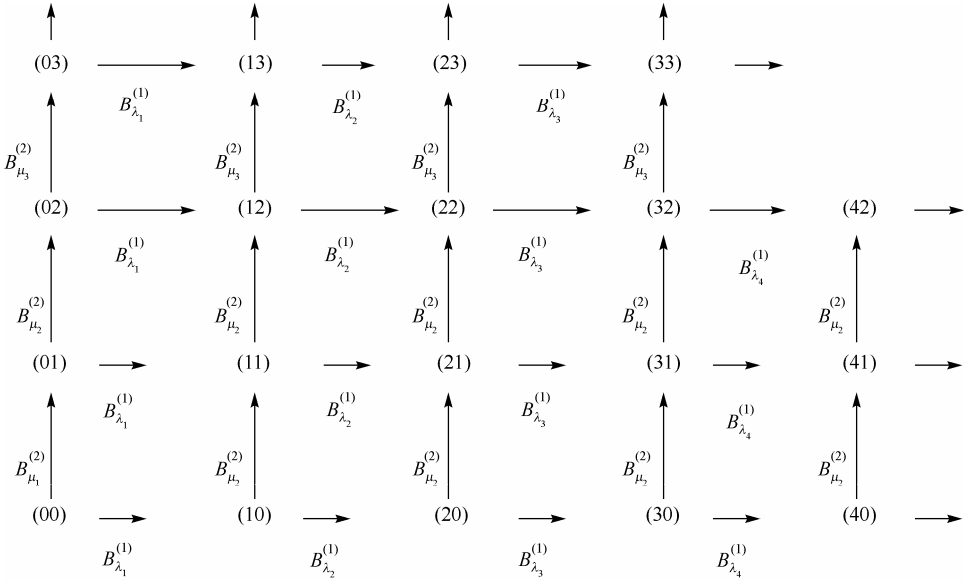


图 3.2 由贝克隆变换得到的无限系解

运用式(3.24)，从式(3.22)和式(3.23)可求出任意解 $P_{(n_1, n_2)}$ 。如果给出 $P_{(00)}$ ， $P_{(10)}$ 和 $P_{(01)}$ ，则可求出 $P_{(11)}$ ，即

$$q_{(11)} = 2(\lambda_1 - \mu_1) \left\{ \frac{1}{2} \exp[-2i\Omega(\mu_1)t' - 2i\mu_1(x' - \bar{x}'_{01})] - 2 \exp[-2i\Omega(\lambda_1)t' + 2i\lambda_1(x' - x'_{01})] \right\}^{-1}$$

$$r_{(11)} = 2(\mu_1 - \lambda_1) \left\{ \frac{1}{2} \exp[2i\Omega(\lambda_1)t' + 2i\lambda_1(x' - \bar{x}'_{01})] + 2 \exp[2i\Omega(\mu_1)t' - 2i\mu_1(x' - \bar{x}'_{01})] \right\}^{-1}$$

运用式(3.24)，从 $P_{(01)}$ ， $P_{(11)}$ 和 $P_{(02)}$ 又可求出 $P_{(12)}$ ，即

$$q_{(12)} = 2(\lambda_1 - \mu_2) / (r_{(02)} / 2 + 2 / q_{(11)}), \quad q_{(21)} = q_{(10)} + 2(\lambda_2 - \mu_2) / (r_{(11)} / 2 + 2 / q_{(20)})$$

$$r_{(12)} = r_{(01)} + 2(\mu_1 - \lambda_1) / (q_{(11)} / 2 + 2 / r_{(02)}), \quad r_{(21)} = 2(\mu_1 - \lambda_2) / (q_{(20)} / 2 + 2 / r_{(11)}) \quad (3.25)$$

$$q_{(22)} = q_{(11)} + 2(\lambda_2 - \mu_2) / (r_{(12)} / 2 + 2 / q_{(21)}), \quad r_{(22)} = r_{(11)} + 2(\mu_2 - \lambda_2) / (q_{(21)} / 2 + 2 / r_{(12)})$$

还可以由式(3.24)求出 $P_{(31)}$ ， $P_{(32)}$ 等解来，此时 $P_{(22)}$ ， $P_{(11)}$ 和 $P_{(nn)}$ 表示了微观粒子的孤子解，它们彼此通过 Backlund 变换式(3.24)相关。如果知道其中一个，则可通过式(3.24)求出另一个孤子解来。如果引入 $r = q$ 和 $r = q^*$ ，则解 $P_{(nn)}$ 可简化为 Sine-Gordon ($\Omega = -4C^+$, $r = q = \partial\varphi/\partial x$, $\lambda = -\mu = \xi$) 和非线性 Schrödinger 方程 ($\Omega = -2L^{+2}$, $r = q^*$, $\mu = \lambda^*$) 的 n 孤立波解。由以上看到，任意解 $P_{(n_1, n_2)}$ 是简单函数 $q_{(10)} \dots q_{(n_0)}$ 和 $r_{(01)} \dots r_{(0n_2)}$ 的函数，或者说线性方程式(3.17)的分立解 $P_{(n_1, n_2)}$ 也可以通过相应线性方程的解

(平面波)的非线性叠加得到。非线性叠加原理式(3.24)表示了无穷组解式(3.25)的简单代数结构特征。

3.3.2 SG方程的 $\phi_{\xi\eta} = \sin\phi$ 的非线性叠加原理

对于式(3.4)的 SG 方程可以化简为 $\phi_{\xi\eta} = \sin\phi$ ，它的叠加原理也可采用

$$\tan\left(\frac{\phi_3 - \phi_4}{4}\right) = \frac{a_1 - a_2}{a_2 + a_1} \tan\left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{4}\right) \quad (3.26)$$

SG 方程的解也满足以下 BT:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\phi_1 - \phi_2}{2} \right) &= a \sin \left(\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right) \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\phi_1 + \phi_0}{2} \right) &= \frac{1}{a} \sin \left(\frac{\phi_1 - \phi_0}{2} \right) \end{aligned} \quad (3.27)$$

3.3.3 非线性傅里叶变换和表象变换关系

由于非线性作用的存在，在线性量子力学中常采用的线性傅里叶变换：

$$\psi(\vec{p}, t') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \psi(\vec{r}, t') e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} d\vec{r}$$

在非线性量子力学中不再成立了。而代之的是下面推出的非线性傅里叶变换。

对于如式(3.2)的非线性薛定谔方程在 $A(\phi) = 0$ 和 $V(x, t) = 0$ 时，所对应的本征方程，按照 Lax 方法，由线性方程 $\hat{L}\Psi = k\Psi$ 来确定。其中 k 是本征值， \hat{L} 是与非线性 Schrödinger 方程的解 ϕ 有关的算符。Zakharov-Shabat (ZS) 将这一本征值方程可表示为

$$i\psi_{1x} - \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \xi \psi_1 = -\left(\frac{g}{\hbar}\right)(m)^{1/2} \phi \psi_2; \quad i\psi_{2x} + \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \xi \psi_2 = \left(\frac{g}{\hbar}\right)(m)^{1/2} \phi \psi_1 \quad (3.28)$$

式中， $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ 是与 Ψ 相关的波函数； ξ 是与 k 有关的实数。与时间有关的上述 ZS 方程可表示为

$$\begin{aligned} i\psi_{1t} &= \left[\frac{\hbar}{m} \xi \left(\frac{g^2}{2\hbar} \right) \phi^* \phi \right] \psi_1 + g(2m)^{1/2} \left[i\xi \phi - \frac{1}{2} \phi_x \right] \psi_2 \\ i\psi_{2t} &= -\left[\frac{\hbar}{m} \xi^2 - \left(\frac{g^2}{2\hbar} \right) \phi^* \phi \right] \psi_2 - g(2m)^{-1/2} \left[i\xi \phi^* + \frac{1}{2} \phi_x^* \right] \psi_1 \end{aligned} \quad (3.29)$$

可证明关于式(3.28)和式(3.29)的可解条件就是 ϕ 必须满足以下的非线性

Schrödinger 方程, 即

$$i\hbar\phi_t = -\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\phi_{xx} - g^2(\phi^*\phi)\phi \quad \text{这里 } g^2 = b \quad (3.30)$$

这个方程可以用反散射方法求解, 其中相应的散射数据 S_l 为

$$S_l = \left\{ \xi_j, F_j \Big|_{j=1}^J; F(\xi)(\xi = \text{constant}) \right\} \quad (3.31)$$

让 ϕ 满足

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\phi(x, t)| dx < \infty$$

如果

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a(\xi) \exp[-i\xi x] \\ -b(\xi) \exp[i\xi x] \end{pmatrix} \quad \text{当 } x \rightarrow \pm\infty \quad (3.32)$$

这里 $a(\xi)$ 和 $b(\xi)$ 满足以下方程:

$$\bar{a}(\xi)a(\xi) + \bar{b}(\xi)b(\xi) = 1, \quad \bar{a}(\xi) = [a(\xi)]^*, \quad g\bar{b}(\xi) = [g\bar{b}(\xi^*)]^* \quad (3.33)$$

而散射数据的连续频谱部分为

$$F(\xi) = b(\xi)/a(\xi) \quad \xi = \text{实数} \quad (3.34)$$

式(3.34)仅是散射数据 S_l 的一个分量。当 $b = g^2 > 0$ 和式(3.30)中 $g^2(\phi^*\phi)\phi$ 项充分大时, 粒子会局域。当 ϕ 是紧致集时, $F(\xi)$ 可以扩展到 ξ 的整个复平面上, 于是 $F(\xi)$ 在上半平面上有极点, 即 $a(\xi)$ 的零点。它由 $[\xi_j]_{j=1}^J$ 来决定, 相当于式(3.28)的束缚态。若将 $\phi(x, t)$ 与散射数据 S_l 联系的变换是一种非线性变换, 从式(3.28)、式(3.29)、式(3.33)和式(3.34), 可得到非线性傅里叶变换关系式为

$$F(\xi, t) = -b^{1/2} m^{1/2} \hbar^{-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^*(x, t) e^{(-2i\xi x)} dx + o(b^{3/2}) \quad (3.35)$$

相应于 $g = \sqrt{b}$ 的最低阶的表示式就是通常的线性傅里叶变换, $o(g^3)$ 是它的非线性部分。这意味着在非线性系数 b 很小时, 仍可近似使用原来的线性傅里叶变换进行表象变换。

3.4 非线性量子力学中的量子化方法

在非线性量子力学中, 也能像在线性量子物理学中一样, 可对其波函数或解进行量子化。当前所采用的量子化方法一般仍为直接量子化方法、正则量子化方法和路径积分的方法。在非线性量子力学由于弱化了力学量的算符表示, 同时由于有非线性效应存在, 使其量子化的具体办法变得十分复杂。下面介绍直接量子化方法和李政道的正则量子化的主要步骤。

3.4.1 直接量子化的方法

现在直接对非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 进行量子化。首先, 讨论一个简单的问题, 即让 $V(x, t) = A(\phi) = 0$, 并用 $2b$ 代替 b , 在 $m = \hbar = c = 1$ 的自然单位系统中, 则式 (3.2) 变成

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(t, x) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(t, x) + 2b\phi^*(t, x)\phi(t, x)\phi(t, x) \quad (3.36)$$

为了对它进行量子化, 我们现在做波矢的空间变换, 并近似采用如下傅里叶变换:

$$a(t, q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(t, x) e^{iqx} dx, \quad \phi(t, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int a(t, q) e^{-iqx} dq \quad (3.37)$$

则在这 q 变换空间中, 其振幅 $a(t, q)$ 的动力学方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} a(t, q) = -q^2 a(t, q) + 2b \int a^*(t, q_1) a(t, q_2) a(t, q + q_1 - q_2) dq_1 dq_2 \quad (3.38)$$

这个场包络能够归一化, 以使它能表示在“某时间”的微观粒子。这便可使 $a(t, q)$ 与某时间的微观粒子的消失算符 $\hat{a}(t, q)$ 等价, 而 $a^*(t, q)$ 和产生算符 $\hat{a}^+(t, q)$ 等价。在式 (3.37) 右边的第一项表示了色散效应, 而第三项的三阶乘积表示非线性效应, 并以一个褶积形式表示出来。这是由于对于宽带场 (wide-broad field), 这里有一个对傅里叶空间的积分变换问题存在。这种量子化可以通过如下的对应关系来完成

$$[\hat{a}(t, q'), \hat{a}^+(t, q)] = \delta(q - q'), \quad [\hat{a}(t, q'), \hat{a}(t, q)] = [\hat{a}^+(q', t), \hat{a}^+(q, t)] = 0 \quad (3.39)$$

则量子化后的方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}(t, q) = q^2 \hat{a}(t, q) + 2b \int \hat{a}^+(t, q_1) \hat{a}(t, q_2) \hat{a}(t, q + q_1 - q_2) dq_1 dq_2 \quad (3.40)$$

显然, 此方程可由算符的海森堡方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{a}(t, q) = [\hat{a}(t, q), \hat{H}] \quad (3.41)$$

来得到, 这里系统的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hbar \left[\int q^2 \hat{a}^+(t, q) \hat{a}(t, q) dq + b \int \hat{a}^+(t, q) \hat{a}^+(t, q_1) \hat{a}(t, q_2) \hat{a}(t, q + q_1 - q_2) dq dq_1 dq_2 \right] \quad (3.42)$$

通过上述产生和消失算符的傅里叶逆变换现可重新定义新的场算符的消灭算符 $\phi(t, x)$ 和产生算符 $\hat{\phi}^+(t, x)$, 并对式 (3.42) 做傅里叶逆变换, 可得到量子化的非线性 Schrödinger 方程为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(t, x) = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} \hat{\phi}(t, x) + 2b \hat{\phi}^+(t, x) \hat{\phi}(t, x) \hat{\phi}(t, x) \quad (3.43)$$

从傅里叶变换式(3.37)和方程式(3.39)可求得场算符满足以下对易关系:

$$[\hat{\phi}(t, x''), \hat{\phi}^+(t, x)] = \delta(x - x''), \quad [\hat{\phi}(t, x''), \hat{\phi}(t, x)] = [\hat{\phi}^+(t, x''), \hat{\phi}^+(t, x)] = 0 \quad (3.44)$$

借助于式(3.44), 可把式(3.43)写成

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\phi}(t, x) = [\hat{\phi}(t, x), \hat{H}] \quad (3.45)$$

这里系统的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \hbar \left[\int \hat{\phi}_x^+(t, x) \hat{\phi}_x(t, x) dx + b \int \hat{\phi}^+(t, x) \hat{\phi}^+(t, x) \hat{\phi}(t, x) \hat{\phi}(t, x) dx \right] \quad (3.46)$$

于是式(3.44)、式(3.45)和式(3.46)就构成了非线性量子力学中的量子动力学方程体系。它形成了在 Heisenberg 表象中的非相对论量子力学。其量子动力学非线性 Schrödinger 方程可从式(3.45)和式(3.46)中推导出来。

但在 Schrödinger 表象中的动力学体系可借助于状态矢量 $|\Phi\rangle$ 的时间演化方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Phi\rangle = \hat{H}_s |\Phi\rangle \quad (3.47)$$

$$\text{来实现这里。} \quad \hat{H}_s = \hbar \left[\int \hat{\phi}_x^+(x) \hat{\phi}_x(x) dx + b \int \hat{\phi}^+(x) \hat{\phi}^+(x) \hat{\phi}(x) \hat{\phi}(x) dx \right] \quad (3.48)$$

式中, $\hat{\phi}(x)$ 和 $\hat{\phi}^+(x)$ 是在 Schrödinger 表象的场算符, 并满足以下对易关系:

$$[\hat{\phi}(x''), \hat{\phi}^+(x)] = \delta(x - x''), \quad [\hat{\phi}(x''), \hat{\phi}(x)] = [\hat{\phi}^+(x''), \hat{\phi}^+(x)] = 0 \quad (3.49)$$

在 Heisenberg 表象中量子非线性 Schrödinger 方程式(3.43)可用量子反散射方法求解。在 Schrödinger 表象中, 式(3.47)能够用 Bether 表示式求解。Lai 等人在 Fock 空间中展开量子态并将其代入式(3.46)中, 则它变成了多个自由度的波函数方程, 很类似于多体系统的动力学方程。对于量子化的 Schrödinger 方程对应的波函数的动力学方程是可以求出解析解的。在此方程下, 对于一个系统的任何量子态总可以在 Fock 空间展开为

$$|\Phi\rangle = \sum_n a_n \int \frac{1}{\sqrt{n}} g_n(x_1, \dots, x_n, t) \hat{\phi}^+(x_1) \cdots \hat{\phi}^+(x_n) dx_1 \cdots dx_n \quad (3.50)$$

这表明 $|\Phi\rangle$ 是由处在真空态中的点 (x_1, \dots, x_n) , 具有权重函数 g_n 的粒子通过产生算符产生的态的叠加。由于这些粒子是波包孤子, 则 g_n 是 x_j 的对称函数。如果要求 a_n 和 g_n 满足归一化条件

$$\sum_n |a_n|^2 = 1, \quad \int |g_n(x_1, \dots, x_n, t)|^2 dx_1 \cdots dx_n = 1 \quad (3.51)$$

将其代入式(3.50)和式(3.48), 并使用式(3.49), Lai 等人得到

$$i \frac{d}{dt} g_n(x_1, \dots, x_n) = \left[-\sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2b \sum_{1 \leq i \leq j \leq n} \delta(x_j - x_i) \right] g_n(x_1, \dots, x_n, t) \quad (3.52)$$

这是一个具有 δ 函数相互作用的一维 Boson 系统的 Schrödinger 方程，在式(3.52)中的时间依赖性能够通过假设解具有形式

$$g_n(x_1, \dots, x_n, t) = g_n(x_1, \dots, x_n) e^{iE_n t} \quad (3.53)$$

而被因式化，则 $g_n(x_1, \dots, x_n)$ 的动力学方程变为

$$\left[-\sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + 2b \sum_{1 \leq i \leq j \leq n} \delta(x_j - x_i) \right] g_n(x_1, \dots, x_n) = E_n g_n(x_1, \dots, x_n) \quad (3.54)$$

因此，我们就把在 Schrödinger 表象的量子化的非线性 Schrödinger 方程简化为具有 δ 函数相互作用势的一维 Boson 系统的偏微分方程。于是量子化非线性 Schrödinger 方程便可用 Bethel 表示式和量子反散射方法求出其解析解了。

3.4.2 对波函数进行量子化

让我们考虑 N 分量实标量场 ϕ^i ，在 $m = \hbar = c = 1$ 的自然单位系统中，其对应的拉普拉斯函数密度在这里可写为

$$L' = -\frac{1}{2} \sum_i \left(\frac{\partial \phi^i}{\partial x_i} \right)^2 - g'^{-2} V(g\phi^i) \quad (3.55)$$

式中， $L' = L$ ；参数“ g' ”起着耦合常数的作用。现假设

$$[\phi^i(r', t)]_{cl} = g'^{-1} \sigma^i(r, t, z_1, \dots, z_k) \quad (3.56)$$

是单个孤子的经典解，其函数 $\sigma^i(r', t, z_1, \dots, z_k)$ 满足

$$\frac{\partial^2 \sigma^i}{\partial x_\mu^2} - \frac{\partial V(\sigma^i)}{\partial \sigma^i} = 0 \quad \mu = 1, 2, 3, 4 \quad (3.57)$$

对于具体的 SG 方程，则 σ 为

$$\sigma(x, z) = 4 \arctan[\exp(r_\mu(x - z))]$$

按照李政道等人采用的正则量子化的方法，可将满足式(3.57)的孤子解向经典孤子解 $g'^{-1} \sigma$ 展开，即

$$\phi^i(\vec{r}, t) = g'^{-1} \sigma(\vec{r}, z_1, \dots, z_k) + \sum_{n=k+1}^{\infty} q_n(t) \phi_n^i \quad (3.58)$$

式中， $q_n(t)$ 满足正则对易关系：

$$[q_n(x, t), q_m^+(y, t)] = \delta_{nm} \delta(x - y) \cdots \quad (3.59)$$

而这 N 分量函数 φ'_n 满足以下的约束条件, 即

$$\sum_{n=1}^N \int \varphi^n \frac{\partial \varphi^n}{\partial z_k} d\tau = 0 \quad (3.60)$$

$$\text{在正交条件下, 有} \quad \sum_{i=1}^N \int \varphi_n^i \varphi_n^i d\tau = \delta_{nn'} \quad (3.61)$$

经过适当运算, 可以得到

$$\begin{aligned} i\delta_k P_k \mu T + \int_0^{\mu T} P_k dz_k - \sum_l \left(N'_l + \frac{1}{2} \right) \omega_n = 2\pi n \\ \text{或} \quad \int_0^{\mu T} \left\{ P_k(z_k) + \frac{1}{\mu} \left(\varepsilon_\alpha - \frac{1}{2} \sum_n \omega_n(z_k) \right) \right\} dz_k = 2\pi n \end{aligned} \quad (3.62)$$

式中, N'_l 是占据数, 且 $N'_l = 0, 1, 2, \dots$; ω_n 是静态经典孤子解 $\sigma(r, z_1, \dots, z_k)$ 在小振动下的单一振动频率。如果进一步假设 $|p\rangle$ 是能量和动量的本征态, 即

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle, \quad \hat{H}|p\rangle = E|p\rangle, \quad E(p) = \sqrt{p^2 + M^2}$$

这时量子场量 ϕ 的正则对易关系对这一本征态的矩阵元可写成

$$\langle p | [\phi(x, t), \phi(y, t)] | p' \rangle = i\delta(x - y) 2\pi \delta(p - p') \quad (3.63)$$

以上是李政道等人提出的对经典孤子解进行在正则量子化的集体坐标法。其主要工作应求出经典孤子解来。但此方法只适合于非线性标量场的内部对称性 G 为 Abel 群的情况。后来, 周光召等人又将它推广到 $G = SU(2)$ 为非 Abel 群的情况。这时系统的拉氏函数密度是

$$L' = -\partial_\mu \phi^+ \partial_\mu \phi - V(\phi, \phi^+) \quad (3.64)$$

这里 $L' = L$ 。相应的经典孤子解为

$$\phi(x) = g(t) \phi_c(x) \quad (3.65)$$

式中, $g(t) = g(\alpha_i(t))$, 群参数 α_i 仅依赖于时间, 而 ϕ_c 满足

$$[i\Omega(t) - \Omega(t)^2] \phi_c(x) = \nabla^2 \phi_c(x) - \frac{\partial V(\phi_c, \phi_c^+)}{\partial \phi_c^+} = 0 \quad (3.66)$$

式中, $i\Omega(t) = g^{-1} \frac{\partial g}{\partial t}$ 。

按前面正则量子化方法, 则有

$$\phi(x) = g(t)[\phi_c(x) + \sum_n q_n(t)\varphi_n(x)] \quad (3.67)$$

式中, 诸函数 $\varphi_n(x)$ 彼此正交, 并满足

$$\int \varphi_n^+(x) g^{-1} \frac{\partial g}{\partial x_k} \phi_c(x) d^3x = 0, \quad \int \varphi_n^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \phi_c(x) d^3x = 0 \quad (3.68)$$

以消去群 G 的不变性和平移不变性带来的零模。适当地选择 $\varphi_n(x)$, 可使 $q_n(t)$ 都为实数, 将式(3.65)代入式(3.66), 利用上式可得到单个孤子的拉氏量为

$$L = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \dot{\alpha}_k M_{kk'} \dot{\alpha}_{k'} + \frac{1}{2} \sum_{nn'} \dot{q}_n M_{nn'} \dot{q}_{n'} + \sum_{kn} \dot{\alpha}_k M_{kn} \dot{q}_n - \int \bar{V} \left(\phi_c + \sum_n \varphi_n q_n \right) d^3x \quad (3.69)$$

$$\text{式中, } M_{kk'} = \int \left(\phi_c^+ + \sum_n q_n \varphi_n^+ \right) \left(\frac{\partial g^{-1}}{\partial \alpha_k} \frac{\partial g}{\partial \alpha_{k'}} + \frac{\partial g^{-1}}{\partial \alpha_{k'}} \frac{\partial g}{\partial \alpha_k} \right) \left(\phi_c + \sum_n q_n \varphi_n \right) d^3x$$

$$M_{nn'} = \int d^3x (\varphi_n^+ \varphi_{n'} + \varphi_n^+ \varphi_n) = 2\delta_{nn'}$$

$$M_{kn} = \sum_{n'} q_{n'} \int \left\{ \varphi_n^+ g^{-1} \frac{\partial g}{\partial \alpha_k} \varphi_{n'}' - (nn') \right\} d^3x, \quad \bar{V} = \nabla \phi^+ \nabla \phi + V(\phi)$$

与广义坐标 $\alpha_k(t)$ (群参数集体坐标) 和 $q_n(t)$ 相关的共轭广义动量为 $P_k = \sum_{k'} M_{kk'} \dot{\alpha}_{k'} +$

$$\sum_n M_{kn} \dot{q}_n; \quad \pi_n = \dot{q}_n + \sum_k M_{kn} \dot{\alpha}_k$$

这时与式(3.69)相应的量子哈密顿量算符为

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{AA'} J^{-1} \hat{P}_A \cdot M_{AA'}^{-1} J \hat{P}_A + \int d^3x \bar{V} \left(\phi_c + \sum_n \hat{q}_n \varphi_n \right)$$

式中, $J = \sqrt{\det(M_{AA'})}$, $\hat{P}_A = \begin{pmatrix} \hat{p}_k \\ \hat{\pi}_k \end{pmatrix}$, $M_{AA'} = \begin{pmatrix} M_{kk'} & M_{k'n} \\ M_{nk'} & M_{nn'} \end{pmatrix}$ 。这里的 $\alpha_k(t)$ 和 $q_n(t)$ 及共

轭动量 $p_k(t)$ 和 $\pi_k(t)$ 在正则量子化时都变成了算符, 并且满足相应的正则对应关系式(3.59)。

3.5 非线性微扰理论

在非线性量子力学中除有以上非线性叠加原理、贝克隆变换、非线性傅里叶变换理论和正则量子化法等理论外, 还有微扰理论和相互作用与散射理论。人们根据这些理论来对一个具体的非线性量子力学体系或问题进行研究或运算。一般来讲, 这两个理论将在后面几章详细介绍, 这里仅对微扰理论做一些简单说明。

在求解非线性运动方程的孤子解时, 往往难以精确确定。但在某些情况下, 可以把某些相互作用项当做微扰来处理, 于是可用微扰理论来研究。可以说微扰理论是求解非线性量子力学问题的基本方法之一。但是, 非线性微扰理论不同于线性微

扰理论，其情况较为复杂，应根据具体问题来具体解决。常有以下两种办法。

3.5.1 线性微扰法

如果 $\phi_0(r, t)$ 是未受微扰时非线性运动方程的孤子解，在线性微扰作用后的波函数可写成

$$\phi = \phi_0 + \varepsilon\phi_1 + \varepsilon^2\phi_2 + \cdots \quad (3.70)$$

这里 ε 是一个小量，表示了微扰作用后其波函数的小的增量变化。将式 (3.70) 代入原非线性动力学方程中，便可得到 ϕ_1 和 $\phi_2 \cdots$ 等满足不同的方程。求解这些方程，我们可得到 ϕ_1 和 ϕ_2 等的具体形式，从而也可求出 ϕ 来。

例如微扰的 SG 方程

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} + \sin \phi + \Gamma \phi_t = \chi \quad (3.71)$$

其微扰参量 Γ 和 χ 很小时，便可以按上述微扰方法处理。在线性微扰理论中，常将式 (3.71) 的解表示成

$$\phi(x, t) = \phi_0(x - vt) + \phi_1(x, t) \quad (3.72)$$

式中， $\phi_1(r, t)$ 是一个小量。将式 (3.72) 代入式 (3.71) 中，可得 ϕ_1 的方程为

$$\phi_{1tt} - \phi_{1xx} - (1 - 2\text{sech}^2 x)\phi_1 + \gamma\Gamma\phi_t - \beta\gamma\Gamma\phi_{1x} = \chi + 2\beta\gamma\Gamma\text{sech} x \quad (3.73)$$

这里 γ 是一个小参量。现用完备组 $\{f_b(x), f_k(x)\}$ 展开 $\phi_1(x, t)$ ，即表示为

$$\phi_1(x, t) = \phi_{1b}(t)f_b(x) + \int_{-\infty}^{\infty} dk \phi_1(k, t)f_k(x) \quad (3.74)$$

$$\text{式中, } f_b(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\text{sech} x, \quad f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ikx}}{\Omega_k} (k + i \tanh x) \quad (3.75)$$

则所要求的解可从式 (3.73) 求出，为

$$\phi_1(x, t) = \frac{\chi}{\sqrt{2\pi}\Omega_k^3} \left[k\delta(k) \frac{\pi\chi}{\text{sech}(\pi k/2)} \right], \quad \phi_{1b}(t) = 2\sqrt{2} \left(\beta + \frac{\pi}{4} \frac{\chi}{\gamma\Gamma} \right) (1 - e^{-\gamma\Gamma t})$$

因此，微扰方程式 (3.71) 的解为

$$\phi(x, t) = 2R(\sin 2R(x - \bar{x}) \exp(-2iq'x - 2i\sigma))$$

式中,
$$R_t = 2\Gamma R - \frac{\pi d}{2} \operatorname{sech} \frac{q'\pi}{2R} \sin x, \quad q'_t = \frac{\pi d q'}{2R} \operatorname{sech} \frac{q'\pi}{2R} \sin x$$

例如微扰的非线性 Schrödinger 方程

$$i\phi_t + \phi_{x'x'} + b|\phi|^2\phi = \varepsilon h(x')\phi \quad (3.76)$$

可设其解为线性微扰解, 庞小峰设为

$$\phi = \phi_0 + \phi_1 = (f + \varepsilon F(x))e^{i\theta(x',t')}$$

这里 $\phi_0 = fe^{i\theta(x',t')}$ 是 $\varepsilon = 0$ 时上述方程的解, 将 ϕ 代入式 (3.76), 可得

$$i\frac{\partial F}{\partial t'} + \frac{\partial^2 F}{\partial X'^2} - v^2[1 - 4\operatorname{sech}^2(vx')]F + 2v^2\operatorname{sech}^2(vX')F^* = v\sqrt{\frac{2}{b}}\operatorname{sech}(vX')h(X' + v_c t)$$

这里 $X' = x' - vt'$, 若再设 $F(y, \tau) = F_1(y, \tau) + iF_2(y, \tau)$, 这里 $y = vX'$, $\tau = v^2t'$, 则上述方程变为易求解的 F_1 和 F_2 的方程, 从而便可以求出其解。

3.5.2 结构微扰法

第二种方法是使微扰方程的解是将原有的未受微扰的解改造后的结果, 并将它代入微扰方程, 来确定新解中这些待定参数的值, 例如

$$i\phi_t + \phi_{x'x'} + b|\phi|^2\phi = \beta\phi_{x'}^* \quad (3.77)$$

其微扰作用为 $\beta\phi_{x'}^*$ 。现设此方程的解为

$$\phi(x', t') = D(x', t')e^{i\theta(x', t')} \quad (3.78)$$

则待定的函数是振幅 D 和 $\theta(x', t')$ 。将式 (3.78) 代入式 (3.77), 可得

$$\begin{aligned} D_{t'} + 2\theta_{x'}D_{x'} - \beta D_{x'} \sin 2\theta - \beta\theta_{x'}D \cos 2\theta + D\theta_{x'x'} &= 0 \\ -D\theta_{t'} - D + D_{x'x'} - D\theta_{x'}^2 + D^3 + \beta D_{x'} \cos 2\theta - \beta\theta_{x'}D \sin 2\theta &= 0 \end{aligned}$$

用 D 乘第一个方程后得

$$\partial_{t'} D^2 + \partial_{x'} [(2\theta_{x'} - \beta \sin 2\theta) D^2] = 0$$

当在 $\theta_{x'} \rightarrow 0$ 的条件下, 有

$$D_{t'} = \beta D_{x'} \sin 2\theta, \quad -D\theta_{t'} - D + D_{x'x'} + D^3 + \beta D_{x'} \cos 2\theta = 0$$

于是 D 是 $z = x' + \beta \int_0^{t'} \sin 2\theta(\tau) d\tau$ 的函数, 则 θ 的解具有 $\theta_{t'} = -\omega + \beta f(z) \cos 2\theta$ 的形式, 这时 D 满足下面的非线性 Schrödinger 方程:

$$(\omega - 1)D + D_{zz} + D^3 = 0$$

如果条件 $f(z) = \partial_z(\ln D)$ 成立, 则

$$D(z) = u_0 \operatorname{sech} \left(\frac{u_0 z}{\sqrt{2}} \right), \quad u_0 = \sqrt{2(1-\omega)}$$

于是便可求出微扰方程式 (3.77) 的解, 为

$$\phi = u_0 \operatorname{sech} \left[\frac{u_0}{\sqrt{2}} \left(x' + \frac{\beta}{2} \cos 2t' \right) \right] \exp \left\{ -i \left(1 - \frac{u_0^2}{2} \right) t' + \beta \frac{u_0}{2\sqrt{2}} \tanh \left(\frac{u_0 t'}{\sqrt{2}} \right) \sin 2t' \right\}$$

因此微扰理论的形式和方法是多种多样的, 需要根据问题的实际情况来决定自己应采用什么样的微扰方法求解方程。一些具体的解法在第 7 章还要详细描述。

3.6 非线性 Schrödinger 方程的本征值问题

3.6.1 非线性 Schrödinger 方程的本征值问题

对于形如式 (3.2) 的非线性 Schrödinger 方程的本征值问题是一个非常难求解的问题。按照 Lax 方法, 非线性方程都可通过它对应的线性本征方程求出其本征值。因此, 我们在这里用 Lax 的方法来研究非线性 Schrödinger 方程的本征值问题及其特点。

如前所述, 在 $V(\vec{r}, t) = A(\phi) = 0$ 时的式 (3.6) 可表示成 $\phi_t = K(\phi)$, $\phi = \phi(\vec{r}', t')$, $t' = t/\hbar$ 。这里 $K(\phi)$ 是定义在某一个适当函数空间上的, 与 $\phi(r, t)$ 有关的非线性算符或遗传算符。它所对应的两个线性算符 \hat{L} 和 \hat{B} 满足 Lax 的算符方程

$$iL_t = \hat{B}\hat{L} - \hat{L}\hat{B} = [\hat{B}, \hat{L}] \quad (3.79)$$

$$\text{式中, } \hat{B} \text{ 为自伴算符, 它满足 } \hat{B}\Psi = i\Psi_t \quad (3.80)$$

而算符 \hat{L} 的本征值 k 和本征函数 Ψ 满足本征方程

$$\hat{L}\Psi = k\Psi \quad (3.81)$$

可证明 k 是不随时间变化的本征能量。事实上将式 (3.81) 两边乘 i 并对 t 微分, 可得

$$\begin{aligned} i \left(\Psi \frac{dk}{dt'} + k \frac{d\Psi}{dt'} \right) &= i \left(\hat{L}\Psi_t + \frac{\partial \hat{L}}{\partial t'} \Psi \right) \\ &= iL\Psi_t + [\hat{B}\hat{L} - \hat{L}\hat{B}]\Psi = \hat{L}(i\Psi_t - \hat{B}\Psi) + k\hat{B}\Psi \end{aligned}$$

由此可得 $i\Psi \frac{dk}{dt'} = 0$ 。由于 $\Psi(\vec{r}, t)$ 不等于零, 则可知 k 是一个与 t' 无关的定态本征值。

故可以从式 (3.81) 求出非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 对应的线性本征值和本征函数。这表明对于任何类型的非线性方程总是可找到与它相应的线性本征方程和定态本征值。实际上, Zakharov 和 Shabat 求出的本征定态波函数和本征值就是依照这条

路线, 将一个非线性化方程化为线性问题, 建立起了反散射的求解方法, 求出了非线性 Schrödinger 方程的孤子解。对于在 $A(\phi) = V(\vec{r}, t') = 0$ 时的式 (3.2) 的非线性 Schrödinger 方程, 能够找到其相应的线性算符, 它们可写成

$$\begin{aligned}\hat{L} &= i \begin{pmatrix} 1+s & 0 \\ 0 & 1-s \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x'} + \begin{pmatrix} 0 & \phi^* \\ \phi & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{B} &= -s \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \begin{pmatrix} \frac{|\phi|^2}{1+s} & i\phi_{x'}^* \\ -i\phi_{x'} & -\frac{|\phi|^2}{1-s} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (3.82)$$

式中, $s^2 = \left(1 - \frac{2}{b}\right)$; $x' = x\sqrt{2m}/\hbar$; $\phi(\vec{r}, t)$ 满足在 $A(\phi) = V(\vec{r}, t') = 0$ 时的式 (3.2)。为了用反散射方法求得式 (3.81) 和式 (3.82) 的解, Zakharov 和 Shabat 在一维情况下, 设

$$\Psi = S \exp(-i\lambda'x')\psi, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}\quad (3.83)$$

式中,

$$S = \begin{pmatrix} 0 & (1-s)^{1/2} \\ (1+s)^{1/2} & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda' = \frac{k}{1-s^2} = b \frac{k}{2}$$

将式 (3.83) 和式 (3.82) 代入式 (3.81) 中, 可得到 ZS 方程:

$$\psi_{1x'} - q\psi_2 = -i\lambda\psi_1\quad (3.84a)$$

$$\psi_{2x'} + q^*\psi_1 = i\lambda\psi_2\quad (3.84b)$$

式中,

$$q = \frac{i\phi}{(1-s^2)^{1/2}} = i\left(\frac{b}{2}\right)^{1/2} \phi, \quad \lambda = \lambda's$$

从式 (3.83) 和式 (3.84) 可以把 ZS 方程写为

$$i\psi'_{x'} + \Phi\psi = \lambda\sigma_3\psi\quad (3.85)$$

式中,

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \Phi = \begin{pmatrix} 0 & \phi \\ \phi^* & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$$

因为 S 不是么正的, 则式 (3.84) 不是自共轭的, 于是可以肯定式 (3.85) 中的本征值 λ 或 k 是复数, 而 Φ 也不是厄米算符。

现设 A 和 A^* 是对应于 $\text{Im } \lambda = \lambda = 0$ 时方程式 (3.85) 的两个解, 并在 $x \rightarrow \pm\infty$ 时, 它们分别满足渐近条件

$$A^* \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\lambda x'} \quad (x' \rightarrow -\infty, \lambda = 0)\quad (3.86a)$$

$$A \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\lambda x'} \quad (x' \rightarrow \infty, \lambda = 0) \quad (3.86b)$$

由于解 A 和 A^* 组成完全系, 则 ψ 可向它们展开为

$$\psi = a(\lambda)A^* + b(\lambda)A, \quad |a(\lambda)|^2 + |b(\lambda)|^2 = 1 \quad (3.87)$$

方程式(3.85)在 $\text{Im } \lambda = 0$ 时的两个解 ψ 和 A 在 $\text{Im } \lambda > 0$ 的复平面上可解析延拓的。

但在 $\text{Im } \lambda = 0$ 处有 $a(\lambda) = (\psi_1 A_2 - \psi_2 A_1)$ 。所以, $a(\lambda)$ 在 $\text{Im } \lambda > 0$ 时是可解析延拓的。

若将式(3.84)代入到式(3.80)的 $\hat{B}\Psi = \partial\Psi/\partial t'$ 中, 则在 $|x'| \rightarrow \infty$ 时, 它变成

$$i\psi_{t'} = -\frac{\lambda^2}{s}\psi + i2\lambda\psi_{x'} - b\psi_{x'x'} \quad (3.88)$$

此方程决定了散射数据的时间演化。但由于式(3.87)给出的 ψ 在 $x' \rightarrow -\infty$ 时的渐近解式(3.86a)不含有时间 t' , 所以它不满足式(3.88), 于是现考虑将它表示成

$$\psi = \bar{\psi} e^{i\alpha t'} \quad (3.89)$$

将它和在 $x' \rightarrow -\infty$ 时的式(3.86a)代入式(3.88), 可得

$$\alpha = -\left(\frac{1}{s} + \alpha + s\right)\lambda^2 \quad (3.90)$$

另外, 在 $x' \rightarrow \infty$ 时, 把对于 ψ 的方程式(3.87)代入式(3.88), 并利用式(3.90), 可得

$$a_{t'} = 0, \quad b_{t'} = i4\lambda^2 b \quad (3.91)$$

对于连续谱 λ 可得散射数据为

$$a(\lambda, t') = a(\lambda, 0) \quad b(\lambda, t') = b(\lambda, 0)e^{i4\lambda^2 t'} \quad (3.92)$$

对于 $\text{Im } k > 0$ 时的离散谱 λ_m , 也可按相同的办法求出。最后, 从式(3.86a)和

$\psi(\alpha, \lambda_m) = c_m A(\alpha, \lambda_m)$ ($m=1, 2, \dots, N$) 可以求出

$$\psi = c_m(t') \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{i\lambda_m x' + i\alpha_m t'} \quad (\text{Im } \lambda_m > 0) \quad (\text{在 } x' \rightarrow +\infty \text{ 时}) \quad (3.93a)$$

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\lambda_m x' + i\alpha_m t'} \quad (\text{Im } \lambda_m > 0) \quad (\text{在 } x' \rightarrow -\infty \text{ 时}) \quad (3.93b)$$

现把它代入式(3.88), 在 $x' \rightarrow -\infty$ 时, 则有

$$\alpha_m = \left(\frac{1}{s} + 2 + s \right) \lambda_m^2$$

在 $x' \rightarrow +\infty$ 时, 则有 $\overline{c_m}(t') = i4k_m^2 \overline{c_m}$, 即

$$\overline{c_m}(t') = \overline{c_m}(0) e^{i4k_m^2 t'} \quad (3.94)$$

于是 Zakharov 和 Shabat 方程式 (3.85) 或本征方程式 (3.81) 的本征函数 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$

和相应的本征值 λ 或 k 值就完全决定了, 其本征函数由式 (3.83) 决定, 本征值分为连续谱 k 或 λ 与离散值 k_m 或 λ_m , 分别由式 (3.90) ~ 式 (3.92) 和式 (3.94) 决定。于是利用反散射方程求解在 $A(\phi) = V(\vec{r}, t') = 0$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 的解时所需要的散射数据 $a(t')$, $b(t')$, $\overline{c_m}(t')$ 等就被全部求出, 并分别表示在式 (3.87)、式 (3.92) 和式 (3.94) 中。最后 Zakharov 和 Shabat 用反散射方法从式 (3.83) 或式 (3.85) 中求出了此类非线性 Schrödinger 方程的解为

$$\phi(x', t') = 2 \left(\frac{2}{b} \right)^{1/2} \eta \operatorname{sech} [2\eta(x' - x'_0) + 8\eta\xi t'] \exp \left[-4i(\xi^2 - \eta^2)t' - i^2\xi t' - i\theta' \right] \quad (3.95)$$

式中, η 是与微观粒子的振幅相关的参数; ξ 是与粒子运动速度相关的参数;

$$\theta' = \arg \gamma', \quad \lambda = \zeta = \xi + i\eta, \quad x'_0 = (2\lambda)^{-1} \log \left(\frac{|\gamma'|}{2\lambda} \right), \quad \gamma' \text{ 是一个常数} \quad (3.96)$$

3.6.2 非线性 Schrödinger 方程的本征值的特点

现在来研究方程式 (3.81) 或式 (3.85) 的本征值 λ 的特性。

如我们所知, 在 Galilei 变换下, 在 $V(\vec{r}, t) = A(\phi) = 0$ 的式 (3.2) 的上述本征值是不会改变的。事实上, 如果将 Galilei 变换

$$\phi'(\tilde{x}, \tilde{t}) = e^{i\eta x' - i\nu^2 t'/2} \phi(x', t'), \quad \tilde{x} = x' - \nu t', \quad \tilde{t} = t' \quad (3.97)$$

代入式 (3.83), 则 Φ 变成

$$\Phi'(\tilde{x}) = \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix} \Phi(x') \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} \quad (3.98)$$

式中, $\theta = \nu x' - \frac{1}{2}\nu^2 t' + \theta_0$, θ_0 是任意常数。则本征函数 $\psi(x')$ 变为

$$\psi'(\tilde{x}) = \begin{pmatrix} e^{i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta/2} \end{pmatrix} \psi(x') \quad (3.99)$$

而本征方程式 (3.83) 也变成

$$i\psi'_x + \Phi'\psi' = \left(\lambda - \frac{v}{2}\right)\sigma_3\psi' \quad (3.100)$$

这表明, 在相对于静止参考系以速度 v 运动的参考系中, 其本征值是减少了 $v/2$ 的。从式(3.95)可知, 微观粒子(孤子)运动的速度 v 是正比于 $2\Re(\lambda_m)$ 的。则当 θ 等于常数, 即 $\theta = \theta_0$, $v = 0$, 则其本征值不变。这意味着非线性 Schrödinger 方程在规范变换 $\phi' = e^{i\theta_0}\phi(x')$ 下是不变的, 此变换称为 $U(1)$ 变换。

Satsume 和 Yajima 研究了在边界条件 $|x| \rightarrow \infty$ 时, $\psi = 0$ 下, 式(3.83)的本征函数的特点。此时, 该方程有多个本征函数和本征值, 这里分别用 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$ 和 $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$ 表示。则对于一个给定的本征函数 $\psi_n(x')$, 式(3.83)变为

$$i\frac{d\psi_n(x')}{dx'} + \Phi(x')\psi_n(x') = \lambda_n\sigma_3\psi_n(x') \quad n=1, 2, \dots, N \quad (3.101)$$

这里 $\psi(x')$ 可用泡利自旋矩阵 σ_1 和 σ_2 表示出来:

$$\psi(x') = \Re[\psi(x')]\sigma_1 - \Im[\psi(x')]\sigma_2 \quad (3.102)$$

这里 \Re 和 \Im 分别表示它们的实部和虚部, 其中 $\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ 。现用 σ_2 左乘式(3.102), 再取它们的转置表示式后, 可以得到

$$-i\frac{d\psi_m^T}{dx'}\sigma_2 - \psi_m^T\Phi^*\sigma_2 = i\lambda_m\psi_m^T\sigma_1 \quad (3.103)$$

这里的上标 T 就表示了它的转置表示式。现用 ψ_n 右乘上式, 并用 $\psi_m^T\sigma_2$ 左乘式(3.101), 然后两者相减, 可以得到

$$(\lambda_n - \lambda_m)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^T\sigma_1\psi_n dx' = 0$$

在计算中使用了边界条件: 在 $|x'| \rightarrow \infty$ 时有 $\psi_n, \psi_m \rightarrow 0$ 。于是可得到所求的本征函数具有如下的正交关系:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^T\sigma_1\psi_n dx' = \delta_{nm} \quad (3.104)$$

还可进一步证明式(3.101)具有以下对称性。

(1) 如果 $\phi(x')$ 满足 $\phi(-x') = \phi^*(x')$, 则当 x' 用 $-x'$ 代替, 并用 σ_2 左乘式(3.101)时, 可以得到

$$i\frac{d}{dx'}[\sigma_2\psi_n(-x')] + \Phi(x')[\sigma_2\psi_n(-x')] = \lambda_n\sigma_3[\sigma_2\psi_n(-x')]$$

由于 $\sigma_2 \psi_n(-x')$ 也是具有本征值为 λ_n 的本征函数, 它在 $|x'| \rightarrow \infty$ 时的渐近区域中

具有 $\sigma_2 \psi_n(-x') \rightarrow 0$ 的特性, 即类似于 $\psi_n(x')$ 的性质, 于是 ψ_n 有如下对称性:

$$\sigma_2 \psi_n(-x') = \delta \psi_n(x') \quad \text{或} \quad \psi_n(-x') = \delta \sigma_2 \psi_n(-x') \quad (\delta = \pm 1)$$

因此, 如果 $\phi(-x') = \phi^*(x')$, 则 $\psi(x')$ 具有 $\psi_n(-x') = \delta \sigma_1 \psi_n(-x') (\delta = \pm 1)$ 的对称性。这可以从上面的推导中用 σ_2 代替 σ_1 后得到。

(2) 如果 $\phi(x')$ 是一个相对于 x' 的对称(或反对称)函数, 即 $\phi(-x') = \pm \phi(x')$, 则 $\psi_n^{(s)}(x') = \sigma_1 \psi^*(-x')$ 也是属于本征值为 $-\lambda_n^*$ 的本征函数。同时, $\psi_n^{(a)}(x') = \sigma_2 \psi^*(-x')$ 时属于本征值为 λ_n^* 的本征函数。这里 ψ_n 的上标 s (或 a) 表示了 ϕ 的对称(或反对称)函数。由于 $\phi(-x') = \phi(x')$, 在式(3.101)中用 $-x'$ 代替 x' , 并做复数共轭, 则可以得到

$$i \frac{d}{dx'} [\sigma_1 \psi^*(-x')] + \Phi(x') [\sigma_1 \psi^*(-x')] = -\lambda_n^* \sigma_3 [\sigma_1 \psi_n^*(-x')]$$

将它同式(3.101)比较, 可发现 $-\lambda_n^*$ 也是一个本征值, 相应的本征函数 $\psi_n^s(x')$ 刚好就是 $\sigma_1 \psi_n^*(-x')$ 。对于 $\phi(-x') = -\phi(x')$ 的情况也有类似的结果, 其值也刚好是在上面推导中用 σ_2 代替 σ_1 后的结果。

以上本征函数所具有的这些对称性在分析式(3.2)的解的特点时是非常有用的。例如, 从解式(3.95)可知, 本征值 λ_n 或 k 的实部 ξ_n 相应于微观粒子(孤子)的速度, 它的虚部 η_n 相应于孤子解的振幅。如果 $\phi(x', t')$ 的初始值具有 $\phi(x', t' = 0) = \pm \phi(-x', t' = 0)$ 的对称性, 则它随时间演变时会衰变为具有本征值为 λ_n 和 $-\lambda_n^*$ 的双对称解。

如果 $\phi(x')$ 是实函数, 从以上的对称性可以得到

$$\psi_n^{(s)}(-x') = \sigma_1 [-\delta \sigma_2 \psi_n^*(-x')] = \delta \sigma_2 \psi_n^{(s)}(x')$$

$$\psi_n^{(a)}(-x') = \sigma_2 [-\delta \sigma_1 \psi_n^*(-x')] = -\delta \sigma_1 \psi_n^{(a)}(x')$$

即 $\psi_n^{(s)}(x')$ 同 $\psi_n(x')$ 有相同的形式, 但与 $\psi_n^{(a)}(x')$ 有相反的形式。当 $\phi(-x') = -\phi(x')$ 和 λ_n 是纯虚数 ($\lambda_n = -\lambda_n^*$) 时, 相应于此本征值正和负的本征函数是简并的。

(3) 如果 $\phi(x')$ 是实函数, 但不是反对称的, 则本征值 λ_n 是纯虚数, 即 $\Re(\lambda_n) = 0$ 。从式(3.101)和它的厄米共轭式, Satsuma 和 Yajima 求出

$$\Re(\lambda_n) \langle n | \sigma_2 | n \rangle = \langle n | \Im[\phi(x')] | \sigma_3 | n \rangle \quad (3.105)$$

这里

$$\langle m | \sigma_2 | n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^+ \sigma_2 \psi_n dx' \quad (3.106)$$

在推导时式中使用了 $[\Phi, \sigma_1] = 2i\Im(\phi)\sigma_3$ 关系。从式(3.105)看出, 如果 $\langle m|\sigma_2|n\rangle \neq 0$, 而 ϕ 是 x' 的一个反对称实函数时, $\Re(\lambda_n)$ 是等于零的。则从对称性(I)可以得出

$$\langle n|\sigma_2|n\rangle = \delta^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^+(-x')\sigma_1\sigma_2\sigma_1\psi_n(-x')dx' = -\langle n|\sigma_2|n\rangle$$

于是, $\langle n|\sigma_2|n\rangle = 0$ 。

(4) 如果初始值具有 $\phi = e^{inx'}R(x')$ 的形式, 这里 $R(x')$ 是实函数, 但不是 x' 的反对称函数时, 则所有的本征值都有共同的实数值 $-\nu/2$ 。这可以用 Galilei 变换来证明。当 $\phi(x', t' = 0) = e^{inx'}R(x')$ 时, 其解不会演变为一列具有不同速度的运动孤子, 但能形成一些束缚态。在这种情况下, 对所有本征值来讲, 所对应的本征函数的实部都是相同的, 故孤子的速度是相同的。

(5) 如果 ϕ 是 x' 的非反对称的实函数, 则可证明如下关系成立:

$$\psi_n^*(x') = i\delta\sigma_3\psi_n(x') \quad (3.107)$$

这里 $\delta = \pm 1$ 。由于 $\Re(\lambda_n) = 0$, 则从式(3.101)的复数共轭式可得到 $\psi_n^*(x') \propto \sigma_3\psi$ 。代式(3.107)进入归一化条件式(3.104), 可得 $\delta = \pm 1$ 。若式(3.84)的本征值是实数, 即 $\lambda = \xi$, 则有

$$i\frac{d\psi}{dx'} + \Phi\psi = \xi\sigma_3\psi \quad (3.108)$$

而 ψ 的自伴函数 $\bar{\psi} = i\sigma_2\psi^*$ 也是式(3.108)的解, 即

$$i\frac{d\bar{\psi}}{dx'} + \Phi\bar{\psi} = \xi\sigma_3\bar{\psi}$$

从式(3.108), Satsuma 和 Yajima 得到

$$\frac{d}{dx'}(\psi^+\psi) = \frac{d}{dx'}(\bar{\psi}^+\psi) = \frac{d}{dx'}(\psi^+\bar{\psi}) = \frac{d}{dx'}(\bar{\psi}^+\bar{\psi}) = 0 \quad (3.109)$$

使用上述边界条件, 可得到式(3.84)的解 $\psi_1(x', \xi)$, $\psi_2(x', \xi)$ 和 $\bar{\psi}_2(x', \xi)$ 满足以下关系:

$$\psi_1^+\psi_1 = \psi_2^+\psi_2 = \bar{\psi}_2^+\bar{\psi}_2 = 1, \quad \bar{\psi}_2^+\psi_2 = \psi_2^+\bar{\psi}_2 = 0$$

从 $\psi_1 = a'(\xi)\bar{\psi}_2 + b'(\xi)\psi_2$ 可以得到 $a'(\xi) = \bar{\psi}_2^+\psi_1$ 和 $b'(\xi) = \bar{\psi}_2^+\psi_1$, 这里 $\psi_1(x', \xi) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi x'}$

(当 $x' = -\infty$ 时), $\psi_2(x', \xi) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+i\xi x'}$, $\bar{\psi}_2(x', \xi) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi x'}$ (当 $x' = \infty$ 时)。

如上面指出的, 当使用一个实(不是反对称的)初始值时, 则微观粒子不会演变成为一个运动孤子, 但可形成一个具有适当频率的波纹状的束缚态。Satauma 和 Yajima 使用微扰方法研究此时形成运动孤子的条件。

如果在式(3.83)中的波函数 ϕ 经历了一个小的变动 $\phi \rightarrow \phi' = \phi + \Delta\phi$ ，则相应的 Φ 的变化为

$$\Delta\Phi = \begin{pmatrix} 0 & \Delta\phi \\ \Delta\phi^* & 0 \end{pmatrix}$$

于是 λ_n 和 ψ_n 也分别变成 $\lambda_n + \Delta\lambda_n$ 和 $\psi_n + \Delta\psi_n$ 。当仅变化到第一阶时，从式(3.83)可得

$$\left[i \frac{d}{dx'} + (\Phi - \lambda_n \sigma_3) \right] \Delta\psi_n + (\Delta\Phi - \Delta\lambda_n \sigma_3) \psi_n = 0$$

用 $\psi_n^T \sigma_2$ 左乘上式，并对 x' 在 $(-\infty, \infty)$ 范围内积分，可得

$$\Delta\lambda_n = -i \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^T \sigma_2 \Delta\Phi \psi_n dx' = - \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^T \Re(\Delta\phi) \sigma_3 \psi_n dx' + i \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^T \Im(\Delta\phi) \psi_n dx'$$

如果 ϕ 是 x' 的非对称实函数，则式(3.108)成立，并有

$$\Delta\lambda_n = \delta < n | \Im(\Delta\phi) \sigma_3 | n > + i \delta < n | \Re(\Delta\phi) | n > \quad (3.110)$$

此式表明，如果 $< n | \Im(\Delta\phi) \sigma_3 | n > \neq 0$ ，则微扰 $\Delta\phi$ 使本征值的实部变成一个有限值。这就是说，在初始值扰动 $\phi(x') + \Delta\phi(x')$ 的情况下，非线性 Schrödinger 方程在 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)变成具有其速度 $2\Re(\Delta\lambda_n)$ 的运动孤子解。如果 ϕ 是实函数或是 x' 的对称或反对称函数时，由于非线性 Schrödinger 方程的本征值具有以上的对称性，则有

$$< n | \Im(\Delta\phi(x')) \sigma_3 | n > = - < n | \Im(\Delta\phi(-x)) \sigma_3 | n >$$

的关系存在。如果 $\Im(\Delta\phi)$ 是一个对称函数，即 $\Re(\Delta\lambda_n) = 0$ ，则 $< n | \Im(\Delta\phi) \sigma_3 | n >$ 趋于零。于是这孤子束缚态不会分解为运动孤子。即使在微扰 $\Delta\phi$ 的作用下也是如此。

Satsuma 和 Yajima 还进一步求得了在具有双峰特性的初始条件： $\phi(x', t' = 0) = \phi_0(x' - x'_0) + e^{i\theta_0} \phi_0(x' + x'_0)$ 时，式(3.83)的本征值的移动情况。这里， ϕ_0 是 x' 的对称实函数， x'_0 和 ϕ_0 是实数。其移动的值可写成

$$\Delta\lambda_n^{\pm} = \delta \left[\sin\theta \langle n | \sigma_3 \phi_0(x' + 2x'_0) | n \rangle \mp \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \langle n | \sigma_3 \phi_0(x') e^{2x'_0(d/dx')} | n \rangle \right] +$$

$$i\delta \left[\cos\theta_0 \langle n | \phi_0(x' + 2x'_0) | n \rangle \pm \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \langle n | \phi_0(x') e^{2x'_0(d/dx')} | n \rangle \right] \quad (3.111)$$

式中,

$$-\delta \cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \langle n | \phi_0(x') e^{2x'_0(d/dx')} | n \rangle - i\delta \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \langle n | \sigma_3 \phi_0(x') e^{2x'_0(d/dx')} | n \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^{(n)T} \sigma_2 \Phi_2 \psi_1^{(n)} dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^{(n)T} \sigma_2 \Phi_1 \psi_2^{(n)} dx'$$

$$-\delta \cos(\theta_0) \langle n | \phi_0(x' + 2x''_0) | n \rangle - i\delta \sin(\theta_0) \langle n | \sigma_3 \phi_0(x' + 2x''_0) | n \rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1^{(n)T} \sigma_2 \Phi_2 \psi_1^{(n)} dx' = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_2^{(n)T} \sigma_2 \Phi_1 \psi_2^{(n)} dx'$$

其中, $\Phi(x') = \Phi_1(x') + \Phi_2(x'), \quad \Phi_1(x') = \sigma_1 \phi_0(x' - x'_0)$

$$\Phi_2(x') = [(\cos(\theta_0)\sigma_1 - \sin(\theta)\sigma_2)\phi_0(x' + x'_0)]$$

相应的本征方程为

$$i \frac{d}{dx'} \psi_n'' + \Phi(x') \psi_n'' = \lambda_n \sigma_3 \psi_n''(x')$$

其本征函数 $\psi_n''(x')$ 满足以下对称和正交关系:

$$\psi_{n\pm}''(-x') = \pm \delta \left[\cos\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \sigma_2 + \sin\left(\frac{\theta_0}{2}\right) \sigma_1 \right] \psi_{n\pm}''(x') \quad \delta \pm 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n+}^{(n)T}(x') \sigma_1 \psi_{n-}''(x') dx' = 0$$

当 $\theta_0 = 0$ 时, $\phi(x')$ 是一个对称实函数, $\Delta\lambda_n^{(\pm)}$ 是一个纯虚数。当 $\theta_0 = \pi$, $\phi(x')$ 是对称实函数且 $\Delta\lambda_n^{(\pm)}$ 是实数时, 则有

$$\Re[\Delta\lambda_n^{(\pm)}(\theta_0 = \pi)] = \mp \delta \langle n | \sigma_3 \phi_0(x') e^{2x'_0(d/dx')} | n \rangle \quad (3.112)$$

$$\Im[\Delta\lambda_n^{(\pm)}(\theta_0 = \pi)] = -\delta \langle n | \sigma_3 \phi_0(x' + 2x'_0) | n \rangle \quad (3.113)$$

在这种情况下, 对于 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 的式 (3.2) 的解会演变为一些孤子对, 每一个孤子对由相等振幅和以相同速度沿相反方向运动的两个孤子组成。对于任一 θ'_0 值, 从式 (3.112) 可得出在 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 时的式 (3.2) 具有偶数个不同速度和振幅的运

动孤子解。由以上研究得知, 在非线性量子力学中非线性 Schrödinger 方程的本征值是一个非常复杂的问题, 具有不同性质的本征函数和本征值。

3.7 非线性系统的哈密顿量的本征能谱

3.7.1 单粒子的本征能量的求法

众所周知, 在线性量子力学中, 由于哈密顿标符与粒子的状态波函数无关, 则哈密顿标符的本征值和本征函数可由它的本征方程 $\hat{H}_0 |\psi(x, t)\rangle = E_0 |\psi(x, t)\rangle$ 求出, 这里 E_0 和 $|\psi(x, t)\rangle$ 就是线性哈密顿算符 \hat{H}_0 的本征值和本征函数。此本征方程恰好是一个定态线性 Schrödinger 方程。但是在非线性量子力学中, 由于哈密顿标符与粒子的状态波函数相关, 如何求它的本征值和本征函数是值得研究的。由于本征态一般居于定态, 于是可设此系统的波函数为式 (3.13), 代入 $A(\phi) = 0$ 的式 (3.2) 可得到准本征方程式 (3.14), 之所以说它“准”是因为哈密顿标符在式 (3.15) 中含有波函数项 $b|\phi'|^2 \phi'$, 其时的本征方程为 $\hat{H}(\phi') = E\phi'$ 。如果对此式左乘 ϕ'^* 并积分, 可求得本征能量为 $E = \int \phi'^*(x, t) |E| \phi'(x, t) dx = \int \phi'^*(x, t) \hat{H} |\phi'(x, t) dx$, 具体为

$$\langle \phi'(\vec{r}) | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + b|\phi'(\vec{r})|^2 | \phi'(\vec{r}) \rangle = E \quad (3.114)$$

这就是单个运动模的微观粒子的哈密顿标符的本征能量值。其中, E 是与时间无关的定态 $|\phi(\vec{r})\rangle$ 的本征能量。

显然, 关于式 (3.2) 的非线性 Schrödinger 方程在 $A(\phi) = 0$ 时可写成

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\phi(\vec{r}, t)\rangle = \hat{H}(\phi) |\phi(\vec{r}, t)\rangle$$

于是求解单模微观粒子的哈密顿算符的本征能量就变成计算哈密顿算符在本征态的能量值。显然它是一个非线性积分问题, 难以求解。其具体的计算仍是求解定态非线性 Schrödinger 方程式 (3.14) 的解的问题, 以上是对连续谱的情况。

3.7.2 分立的多模或多自由度或多粒子系统的本征能量的求法

也可用另一种方法求哈密顿算符的本征能谱, 即把哈密顿算符在二次量子化表象或粒子数表象中表出。这时微观粒子的状态波函数是用粒子的产生和消灭标符表示的, 于是包含有粒子状态波函数的哈密顿算符, 都用这些产生和消灭标符表示。则可求出其哈密顿算符的本征值了。现在, 我们用这种方法来研究哈密顿量的本征值问题。对于有多个运动模的一个多粒子系统, 此时连续性的非线性 Schrödinger 方

程应当用分立的非线性 Schrödinger 方程代替, 即把粒子场格点化。对于处于格点化场中的 $A(\phi)=0$ 的式(3.2)的非线性 Schrödinger 方程可表示为

$$i\hbar \frac{\partial \phi_j}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2mr_0^2}(\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}) - b|\phi_j|^2 \phi_j + V(j,t)\phi \quad j=1,2,3,\dots,J \quad (3.115)$$

式中, r_0 是晶格场中相邻格点之间的距离; j 是粒子所处的位置; J 是晶格场总的格点数。它可以表示成矢量形式为

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{mr_0^2} - V(j,t) \right] \bar{\phi} = -\varepsilon M \bar{\phi} - b \text{diag}(|\phi_1|^2, |\phi_2|^2, \dots, |\phi_\alpha|^2) \bar{\phi} \quad (3.116)$$

式中, $\bar{\phi}(x,t)$ 是一个柱矢量, 即 $\bar{\phi}(x,t) = \text{Col.}(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_\alpha)$; α 是它运动模的编号; b 是非线性相互作用常数; $\varepsilon = \hbar^2/2mr_0^2$; $M = [M_{nl}]$ 是一个 $\alpha \times \alpha$ 阶实对称矩阵元; n 和 l 也是表示运动模的整数。对于这个系统的分立的哈密顿量和粒子数可分别表为

$$H = \sum_{N=1}^{\alpha} \left(\hbar\omega_0 |\phi_n|^2 - \frac{1}{2}b|\phi_n|^4 \right) - \varepsilon \sum_{n \neq l}^{\alpha} M_{nl} \phi_n \phi_l \quad \text{和} \quad N = \sum_{N=L}^{\alpha} |\phi_n|^2 \quad (3.117)$$

其中 $\hbar\omega_0 = \hbar^2/2mr_0^2 + V(j,t)$ 。可假设 $V(j,t)$ 与 j 和 t 无关。在二次量子化表象中复数振幅或场量 (ϕ_n^* 和 ϕ_n) 可用产生和消灭标符 \hat{B}_n^+ 和 \hat{B}_n 来表示。但它作用于粒子态上时, 则具有

$$\hat{B}_n |m_n\rangle = \sqrt{m_n+1} |m_n+1\rangle, \quad \hat{B}_n |m_n\rangle = \sqrt{m_n} |m_n-1\rangle \quad \text{和} \quad \hat{B}_n |0\rangle \geq 0$$

由于没有对这些算符的排列顺序做特别规定, 则其平均值可写成

$$|\phi_n|^2 \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \hat{B}_n \hat{B}_n^+)$$

和

$$|\phi_n|^4 \rightarrow \frac{1}{6}(\hat{B}_n^+ \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n \hat{B}_n^+ + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n \hat{B}_n^+ + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n^+ \hat{B}_n)$$

这里 \hat{B}_n^+ 和 \hat{B}_n 是波色子产生和消灭标符, 并有 $\hat{B}_n \hat{B}_n^+ - \hat{B}_n^+ \hat{B}_n = 1$, 于是式(3.117)变成

$$\hat{H} = \sum_{n=1}^{\alpha} \left[\left(\hbar\omega_0 - \frac{1}{2}b \right) \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}b \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \hat{B}_n^+ \hat{B}_n \right] - \varepsilon \sum_{n \neq l}^{\alpha} M_{nl} \hat{B}_n^+ \hat{B}_l \quad (3.118)$$

$$\hat{N} = \sum_{n=1}^{\alpha} \left(\hat{B}_n^+ \hat{B}_n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.119)$$

从现在起将使用表示式 $[m_1, m_2, \dots, m_\alpha]$ 去表示粒子态的乘积 $|m_1\rangle |m_2\rangle \dots |m_\alpha\rangle$, 则求解非线性 Schrödinger 方程式(3.115)所对应的哈密顿算符 \hat{H} 的本征能量问题, 现在就变成了求解哈密顿算符 \hat{H} 和粒子数 \hat{N} 的共同本征态和相应的本征值问题。对于一

个 $m = m_1 + m_2 + \cdots + m_j$ 的 m 量子激发态(这里 $m < \alpha$)，其粒子数标符 \hat{H} 的本征态可写成

$$|\Phi_m\rangle = C_1 [m, 0, 0, \cdots, 0] + \cdots + C_2 [0, m, 0, 0, \cdots, 0] + \cdots + C_i [0, 0, 0, \cdots, m] + \cdots + C_{i+1} [m-1, m, 0, 0, \cdots, 0] + \cdots + C_p [0, 0, 0, \cdots, 0, \underbrace{1, 1, \cdots, 1}_{m\text{次}}] \quad (3.120)$$

在此式中所包含的项数等于把 m 个量子放到 α 位置上的分配数，则它为 $P = \frac{(m + \alpha - 1)!}{m!(\alpha - 1)!}$ 。

则函数式(3.120)是粒子数算符 \hat{N} 。对于确定值 C'_α 的本征函数，由于 \hat{N} 和 \hat{H} 是对易的，则式(3.120)也是 \hat{H} 的本征函数，因此有

$$\hat{H}|\Phi_m\rangle = E|\Phi_m\rangle \quad (3.121)$$

此式中的柱矢量 $\bar{C} = \text{Col.}(C_1, C_2, \cdots, C_p)$ 要求满足以下矩阵方程：

$$[H - IE]\bar{C} = 0 \quad (3.122)$$

式中， $H = \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle$ 是 $p \times p$ 阶的实数对称矩阵元； I 是 $p \times p$ 阶的么正矩阵； E 刚好就是要求的系统的哈密顿算符式(3.118)的本征能量。因此，只要知道这个系统或微观粒子的 ε, ω_0 和 b 值，就能从式(3.122)求出该系统的本征能谱。庞小峰和 Scott 等人用此方法求出了各种分子、分子晶体和其他系统的本征能谱。所得出的结果与实际测出的光谱值很一致。一个系统的具体计算将会在第 8 章中给出。

3.8 相对性非线性量子力学理论

3.8.1 基本动力学方程和相应的局域态

在线性量子力学中，对应于非相对论的 Schrödinger 方程的相对论动力学方程是 Klein-Gordon 方程和 Daric 方程。在非线性量子力学中，式(3.4)～式(3.5)是对应于非相对论的非线性 Schrödinger 方程式(3.2)的相对论动力学方程。在自然单位制下，它们都可用非线性 Klein-Gordon (NLKG) 方程

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} = F(\phi) = -\frac{\partial U}{\partial \phi} = -U'(\phi) \quad (3.123)$$

来表示，相应的系统的哈密顿量为

$$H = \int \left[\frac{1}{2} \phi_t^2 - \frac{1}{2} \phi_x^2 + U(\phi) \right] dx \quad (3.124)$$

这里 $F(\phi)$ 是场力，它是 ϕ 的函数； $U(\phi)$ 是势场，它是 ϕ 的非线性函数。 $F(\phi)$ 可以

有多种不同的形式。当 $F(\phi) = \sin \phi$ 时, 式 (3.123) 是 Sine-Gordon (SG) 方程。在 $F(\phi) = \sin \phi + \lambda \sin 2\phi$ 时, 它是双 SG 方程。当 $F(\phi) = -\phi + \phi^3$ 时, 式 (3.123) 是 ϕ^4 场方程; 在 $F(\phi) = \phi - \phi^3$ 时, 它是 ϕ_+^4 场方程。它们都对应于不同的微观粒子的相对论运动。这些动力学方程都是具有局域性质的孤子解。不过, ϕ^4 场方程可看成是 SG 方程的特殊情况, 即是 $\sin \phi$ 展开后的前两项构成的方程。对于多维情况, 则有

$$\phi_{tt} - \sum_{i=1}^3 \phi_{x_i x_i} = -\frac{\partial U}{\partial \phi} = -U'(\phi) = F(\phi) \quad (3.125)$$

对于 ϕ^4 场方程在四维闵可夫斯基空间的协变形式可写成 $\partial_\mu \phi \partial'_\nu \phi^* + \phi - \phi^3 = 0$ 。

当 $U'(\phi) = \phi$ 时, 上式变为线性量子力学中通常的 Klein-Gordon 方程: $\phi_{tt} - \phi_{xx} = \phi$, 它有平面波解, 描述了质量为 1 的自由玻色子的运动规律。

由式 (3.123) 的场方程在设 $\xi = x - vt$ 后, 它的解可由方程 $\int \frac{d\phi}{\sqrt{2[U(\phi) - C]}} = \gamma(\xi - \xi_0)$ 求出, 其中 $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}$, 这里 C 是积分常数。在边界条件 $\left(\frac{d\phi}{d\xi}\right)\bigg|_{\xi \rightarrow \pm\infty} \rightarrow 0$ 下解变为

$$\pm(\xi - \xi_0) = \frac{1}{\sqrt{2\gamma^2}} \int \frac{d\phi}{\sqrt{|U(\phi)|}}$$

只要知道 $U(\phi)$ 的具体形式, 便可由此式求出其场方程的解。

对于 ϕ^4 场方程, 其解可以写成

$$\phi = \pm \tanh \left(\frac{1}{2} \frac{x - vt}{\sqrt{1-v^2}} \right) \quad (3.126)$$

式中, “+” 表示组结孤子; “-” 表示反组结孤子。在四维闵可夫斯基空间中可写成协变形式: $\partial_\mu \partial_\nu \phi + \phi - \phi^3 = 0$ ($\mu, \nu = 1, 2, 3, 4$)。

此方程被李政道等人首先引入到基本粒子物理学中去描述强子的运动和说明夸克的禁闭, 以及超重核的反常核态等问题。

对于一维的 ϕ^4 场方程 $\phi_{tt} - \phi_{xx} = -\phi + \phi^3$ 的解则为非拓扑性孤子:

$$\phi = \phi_0 \operatorname{sech} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (x - vt) / (1 - v^2)^{1/2} \right] \quad (3.127)$$

其单孤子解的能量关系很容易求出, 为 $E_k(v) = \sqrt{E_k^2(0) + P^2} = \gamma E_k(0)$, 这里 $P = \gamma M_k v$,

$E_k(0) = M_k = 2 \int U[\phi_k(\xi)] dx = \sqrt{2} \int_{\phi_1}^{\phi_2} \sqrt{U} d\phi$ 是孤子在静止坐标系中的能量和质量, ϕ_1 和 ϕ_2 是局域势能对应的两个极小值, “+” 和 “-” 是对应于 Kink ($d\phi/d\xi > 0$) 和反 Kink ($d\phi/d\xi < 0$) 解。

对于形如 $\phi_{tt} - \phi_{xx} = \sin \phi$ 的 Sine-Gordon 方程, 具有拓扑性孤子解, 为

$$\phi = 4 \arctan \left\{ \pm \left[\exp \pm \left(\frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2}} \right) \right] \right\} \quad (3.128)$$

在方括号内外若均取正号时, 表示从 $\phi = 0(x = -\infty)$ 到 $\phi = -2\pi(x = \infty)$ 的正扭结。

当方括号内外均取负号, 表示 $\phi = -2\pi(x = -\infty)$ 到 $\phi = 0(x = \infty)$ 的正扭结。若方括号内外取异号时, 表示相应的反扭结解。因此, 以上的相对论动力学方程都有局域性质孤子解, 能用来描述相对论下的微观粒子的波-粒二象性。

3.8.2 相对论动力学方程与非相对论动力学方程之间的自洽性

可以严格证明, 在非相对论下, 上述相对论动力学方程可以变成非线性 Schrödinger 方程。为此, 用以下二维的 ϕ^4 场方程来证明这个问题

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} - m^2 \phi + b\phi^3 = 0 \quad (3.129)$$

边界条件是在 $y = 0$ 和 $y = a$ 时, $\phi = 0$ 。在线性近似(即 $b \approx 0$)下, 如果假定

$$\phi(x, y, t) = \tilde{\phi}(\tilde{y}) e^{i(kx - \omega t)} \quad (3.130)$$

将式(3.130)代入式(3.129), 可得

$$\tilde{\phi}(\tilde{y}) = A \sin(\eta y) + B \cos(\eta y) \quad (\eta^2 = \omega^2 - k^2 - m^2)$$

由上述边界条件可得到

$$B = 0, \quad \eta^2 = \omega^2 - k^2 - m^2 = \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \quad n = 1, 2, \dots$$

因此, 从色散关系 $\omega(k, \eta) = 0$ 可知此时系统存在着由 n 决定的多种运动模式。对于给定的 n , 如果让 k (或者 ω) 固定, 则 ω (或 k) 就决定了。现在考虑 $n = 1$ 时对于振幅缓慢变化即速度较小的非相对论情况下的动力学特性。此时可设

$$\xi = \varepsilon(x - vt), \quad \tau = \varepsilon^2 t \quad (3.131)$$

式中, ε 为一个小参数。令

$$\frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon^3 \frac{\partial}{\partial t} - \varepsilon v \frac{\partial}{\partial \xi}$$

则可把式(3.129)的解展开成 ε 的级数:

$$\phi = \sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon^n \phi^{(n)}, \quad \phi^{(n)} = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \phi_{\ell}^{(n)}(\xi, \tau, \eta) e^{i(kx - \omega t)} \quad (3.132)$$

其相应的色散关系为 $v = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{k}{\omega}$, 将它和式(3.132)代入式(3.129), 从 ε 的一次项方程可求得

$$\phi_l^{(1)} = \varphi(\xi, \tau) \sin(\eta y) \quad \text{和} \quad \phi_l^{(1)} = 0 \quad |l| \neq 1$$

对于 ε 的二次项, 有方程为

$$2il(k - v\omega) \frac{\partial \phi_l^{(1)}}{\partial \xi} + \frac{\partial^2 \phi_l^{(2)}}{\partial y^2} + (l^2 \omega^2 - l^2 k^2 - m^2) \phi_l^{(2)} = 0$$

因为 $v = k/\omega$, 故第一项为零, 因此, 对于 $|l| \neq 1$, 我们得到 $\phi_l^{(2)} = 0$ 。

对于 ε 的三次项, 则有

$$\frac{\partial^2 \phi_l^{(3)}}{\partial y^2} + \eta^2 \phi_l^{(3)} + \left[2i\omega \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + (1 - v^2) \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} \right] \sin \eta y - 3k |\varphi|^2 \varphi \sin^2 \eta y = 0$$

应用匹配条件, 并从左边乘以 $\sin \eta y$, 再对它从0到 a 对 y 积分, 根据函数的匹配条件, 则第一项和第二项变成零, 于是得到

$$i\varphi_{\tau} + \frac{\omega^2 - k^2}{2\omega^3} \varphi_{\xi\xi} - \frac{3k}{2\omega} |\varphi|^2 \varphi = 0$$

由于 $\omega^2 < k^2$, 则在 $k > 0$ 时, 上式就是在非相对论情况下的非线性 Schrödinger 方程。其解为包络的非拓扑性孤子。在 $k < 0$ 时, 振幅调制不稳定, 则由原来的非拓扑性孤子变成了拓扑性孤子。

从以上证明可知, 在非相对论近似下, ϕ^4 相对论场方程能退化为非线性 Schrödinger 方程。

除此之外, Sine-Gordon (SG) 方程: $\phi_{tt} - \phi_{xx} = \sin \phi$ 在非相对论情况下, 也能得到非线性 Schrödinger 方程。事实上, 对于小振幅的微观粒子也可作为式(3.130)和式(3.131)的假设。此时若仅保留 $\sin \phi$ 展开的前二项下, 在 ε^3 阶时, 我们也能推导出非线性 Schrödinger 方程, 它为

$$i\varphi_t + \frac{1 - v'^2}{2w'} \varphi_{\xi\xi} - \frac{1}{6w'} |\varphi|^2 \varphi = 0$$

式中, $w' = \pm\sqrt{1+k^2}$; $v' = \pm k/\sqrt{1+k^2}$ 。

另外, 上述这个 Sine-Gordon 方程有以下的呼吸解:

$$\tanh\left(\frac{\phi}{4}\right) = \frac{v}{\sqrt{1-v^2}} \frac{\sin(\sqrt{1-v^2}\xi')}{\cosh(v\xi)}$$

式中, $\xi = dx + t/d$; $\xi' = dx - t/d$, $d > 0$ 。如果上述解利用 $\operatorname{arctanh}\phi$ 展开到第一阶时, 可得

$$\phi \approx \frac{2iv}{\sqrt{1-v^2}} \operatorname{sech}(v\xi) e^{i(1-v^2/2)\xi'} + \text{c.c.} = \varphi(\xi, \xi') e^{i\xi'} + \text{c.c.}$$

式中, $\varphi(\xi, \xi') = \frac{2iv}{\sqrt{1-v^2}} e^{-iv^2\xi'/2} \operatorname{sech}(v\xi)$ 。现将此式代入以上 Sine-Gordon 方程, 在非相对论情况下, 仅保留 $O(v^2)$ 项, 则可得到下列非线性 Schrödinger 方程:

$$i\varphi_{\xi'}(\xi, \xi') - \frac{1}{2}\varphi_{\xi\xi} - \frac{1}{6}|\varphi|^2\varphi = 0$$

此外, 对于 ϕ_+ 方程 $\phi_{tt} - \phi_{xx} + m^2\phi - b\phi^3 = 0$, 可以设其解为 $\phi(x, t) = \varphi(x, t)e^{-imt}$, 将后式代入前式中, 在 $i\frac{\partial\varphi}{\partial t} \square 2m\varphi$ 的非相对论情况下, 则有

$$i\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\varphi_{xx} - \frac{b}{2m}\varphi^3$$

这也是标准的非线性 Schrödinger 方程。

因此, 不论 ϕ^4 场方程, 还是 Sine-Gordon 方程在非相对论情况下都能退化为非线性 Schrödinger 方程。因此, 在非线性量子力学中在相对性理论和非相对性理论之间仍是自洽的。

3.8.3 相对论理论具有的洛伦兹协变性

在自然单位制下的 Sine-Gordon 方程

$$\phi_{tt} - \phi_{xx} + m^2 \sin \phi = 0 \quad (3.133)$$

具有的 Kink 孤子解为

$$\phi(x, t) = \pm \operatorname{artanh} \left(\pm \left[\exp \left(\pm m \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1-v^2}} \right) \right] \right) \quad (3.134)$$

这里的“ \pm ”分别相应于方程正和反 Kink 孤子解, $x(t) = x_0 + vt = q_0$ 表示了在 t 时间孤子解所在的位置。Fogal 和 Olsen 等人证明这类孤子在做匀速运动。相应的粒子能量为

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} [\phi_x^2 + \phi_t^2 + 4m^2 \sin^2(\phi/2)] dx = 8m/\sqrt{1-v^2}, \text{ 其孤子的质量 } M = \int |\phi|^2 dx = 8m.$$

这表明它们都是常数,具有粒子的特性。此外,该孤子的宽度为 $\sqrt{1-v^2}/m$,即它 $\sqrt{1-v^2}$ 倍于静止 Kink 的孤子的宽度, m 是与微观粒子的质量相关的量。这个结果表明由 $\phi(x,t)$ 表示的微观粒子的状态在其质心位置 $q_0 = x_0 + vt$ 附近随 m 的改变而变化。因此,这个孤子就是局域在质心 q_0 附近的有限长度范围内,其 q_0 和 m^{-1} 则表示了所形成的 Kink 孤子的位置和宽度或大小,于是其粒子特性被显示出来。但它们还受洛伦兹因子 $\gamma = \sqrt{1-v^2}$ 的控制,即,它的位置和宽度都与粒子的速度或洛伦兹因子 γ 相关。至此,其粒子的大小随速度的增加而减少,即出现“长度”随运动速度增加而减少的洛伦兹收缩现象。因此,在非线量子力学中,相对论性质运动的粒子仍具有洛伦兹收缩的性质,这与原有的相对性理论结果一致。

还能证明在这一理论体系下的微观粒子也具有洛伦兹协变性。显然,相应于式(3.133)的系统的拉格朗日函数为

$$L = \int \left[\frac{1}{2} \phi_t^2 - \frac{1}{2} \phi_x^2 + (\cos \phi - 1) m^2 \right] dx \quad (3.135)$$

相应的哈密顿函数为
$$H = \int \left[\frac{1}{2} \phi_x^2 - (\cos \phi - 1) m^2 \right] dx \quad (3.136)$$

相应的动量为 $P = - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_t \phi_x dx$ 。

很容易证明,在洛伦兹变换

$$\begin{pmatrix} \bar{t} \\ \bar{x} \end{pmatrix} = (1-v^2)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix}$$

下, H 和 P 都保持不变,即

$$\begin{pmatrix} \bar{H} \\ \bar{P} \end{pmatrix} = (1-v^2)^{-\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & -v \\ -v & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H \\ P \end{pmatrix}$$

因此,由 SG 方程描述的系统具有洛伦兹不变性,即粒子的能量和动量都具有洛伦兹协变的特点,适合于描述相对论下的微观粒子体系,从而可以它们为中心建立起满足相对论要求的非线性量子场论。

对于用 ϕ^4 场方程描述的微观粒子,也可以证明它们具有这种相对论的协变性。因此,以上列出的相对论下的动力学方程适合于去描述在相对论情况下的微观粒子的特点。

另外,上述 SG 方程式(3.133)也满足海森堡方程,即

$$\phi_{tt} = \{ \phi_t, H \} = \int \left(\frac{\partial \phi_t}{\partial \phi} \frac{\delta H}{\delta \phi_t} - \frac{\partial \phi_t}{\partial \phi_t} \frac{\delta H}{\delta \phi} \right) dx$$

它具有的守恒定律可表示为
$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{C}_v(\phi) + \frac{\partial}{\partial x} \tilde{T}_v(\phi) = 0$$

式中, $C_1 = H - P = \int \phi_x^2 dx$; $C_3 = \int (\phi_x^5 - \phi \phi_{xx}^2) dx$; $C_5 = \int (\phi_x^6 - 20 \phi_x^2 \phi_{xx}^2 + B \phi_{xxx}^2) dx$ 。

3.8.4 在相对论情况下微观粒子的运动和相互作用特性

在相对论中, 微观粒子之间的相互作用和碰撞也具有和将在下章给出的非相对论时由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子之间的相互作用特性。

对于由式(3.128)的 SG 方程描述的粒子间的散射相互作用可用解析方法求出其解(参见第 7 章), 其粒子-粒子散射解如图 3.3(a) 所示, 其解析表示式为

$$\tan \frac{\phi}{4} = \frac{v \operatorname{sh}\left(x/\sqrt{1-v^2}\right)}{\operatorname{ch}\left(vt/\sqrt{1-v^2}\right)}$$

它的 Kink 孤子与 Kink 孤子散射作用的粒子-反粒子散射解如图 3.3(b), (c) 所示, 其表示式为

$$\tan \frac{\phi}{4} = \frac{\operatorname{sh}\left(vt/\sqrt{1-v^2}\right)}{v \operatorname{ch}\left(x/\sqrt{1-v^2}\right)}$$

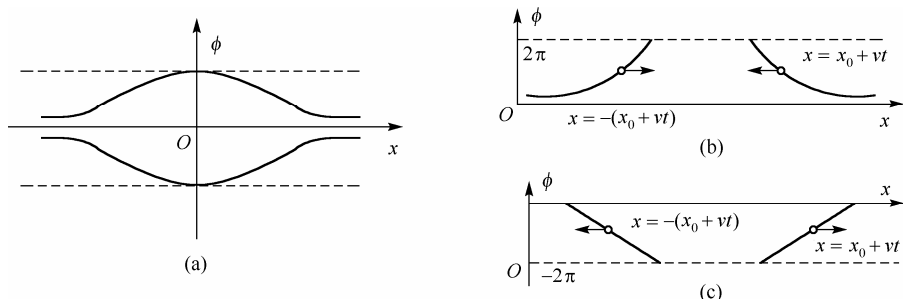


图 3.3 (a), (b) 和 (c) 由 Sine-Gordon 方程描述的粒子的相互散射的孤子解

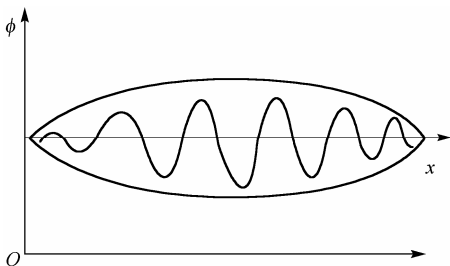


图 3.4 由 Sine-Gordon 方程描述的粒子的孤子-孤子束缚态解

它的 Kink 孤子与反 Kink 孤子吸引作用后形成的粒子-粒子组成的束缚态解为

$$\tan \frac{\phi}{4} = \frac{v \sin\left(x/\sqrt{1-v^2}\right)}{\operatorname{ch}\left(vt/\sqrt{1-v^2}\right)}$$

它具有一张一缩的运动状态, 所以常称为“呼吸子”解, 很类似于量子场论中的正-负粒子束缚态, 如图 3.4 所示。

对于无外势场和衰减作用〔例如在式(3.4)到式(3.5)中 $A(\phi)=0$ 和 $\gamma=0$ 〕,

Sine-Grodon 方程

$$\phi_{tt} - v_0^2 \phi_{xx} + \omega_0^2 \sin \phi = 0 \quad (3.137)$$

的解类似于式(3.134)。若粒子受到一个外场的微扰作用, 则粒子的状态可写成

$$\phi(x, t) = \phi_0(x, t) + \varphi(x, t) \quad (3.138)$$

现在把 $\phi_0(x, t)$ 简单地表示为 $\phi_0(x, t) = 4\arctan[e^{w_0(x-vt)/(1-v^2)}]$, 而 $\varphi(x, t)$ 是由外场引起的粒子状态的变化。当外场是微扰作用时, 将式(3.138)代入式(3.137)可得

$$\varphi_{tt} - v_0^2 \varphi_{xx} + \omega_0^2 \left[1 - 2\operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_0 z}{2}\right) \right] \varphi = 0 \quad (3.139)$$

式中, $z = (x - vt)/(1 - v^2)$ 。现假设 $\varphi(x, t) = f(x)e^{-i\omega t}$, 则 $f(x)$ 满足的方程为

$$-v_0^2 f_{xx} - \omega_0^2 \left[1 - 2\operatorname{sech}^2\left(\frac{\omega_0 z}{2}\right) \right] f = \omega^2 f \quad (3.140)$$

由于在此条件下该系统的拉格朗日函数 L 和哈密顿函数 H 具有平移不变性, 则单个微观粒子(孤子)的频谱必须保留 $\omega = 0$ 的平移模(Goldstone模), 即 $\omega = \omega_{0,1} = 0$ 。于是式(3.140)的解可写成

$$f_{0,1} = \sqrt{\frac{\omega_0}{2v_0}} \operatorname{sech}\left(\frac{\omega_0 z}{2}\right)$$

它满足

$$f_{0,1} = \sqrt{\frac{A}{M_k}} \frac{d\phi_0(x)}{dx}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f_{0,1}^2(x) dx = 1$$

则系统的完整波函数解可写成

$$\phi(x, t) = \phi_0(x) + \varepsilon f_{0,1}(x) = \phi_0 + \varepsilon \sqrt{\frac{A}{M_k}} \frac{d\phi_0(x)}{dx} \approx \phi_0 \left(x + \varepsilon \sqrt{\frac{A}{M_k}} \right) = \phi(x, X) \quad (3.141)$$

式中, ε 是一个小量。 $X = -\varepsilon \sqrt{A/M_k}$ 。式(3.141)表明微观粒子在受外场微扰后, 运动过了一段距离 X , 即它的质心运动了一段路程后仍能保持原来的状态。这很类似于3.1节讲的由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子和宏观经典粒子的特点。因此, 由式(3.137)描述的微观粒子具有明显的粒子特性。

Dodd 等人研究了由式(3.133)的 SG 方程描述的微观粒子的运动特点。他们认为正 Kink ($+\phi(x, t)$) 和正电荷粒子, 以及反 Kink ($-\phi(x, t)$) 和负电荷粒子很类似。他们数

值模拟了局域在 $x = +q = x_0 + vt$ 和 $x = -q = -(x_0 + vt)$ 的两个静止 Kink 孤子组成初始

态的时间演化特征，如图 3.5 所示。此图示出了在运动开始后它们彼此离开的情况，即它们之间存在排斥作用。这里使用了边界条件 $\phi(t, -\infty) = \phi(t, +\infty) = 0$ 或 2π 。在图 3.6

中示出了初始时在 $x = q$ 的 Kink 与 $x = -q$ 的反 Kink 之间的相互作用。在 $t > 0$ 的时，随时间的增加，这两个孤子对向运动，彼此靠近。就像受到一个吸引力的作用而最后结合成一个 Kink-反 kink 对。这可以认为是由于边界约束条件引起的结果。对于由 SG 方程描述的两个 Kink 孤子解，在它们运动过一段距离后，其初始组态改变了 2π 。这导致了高的场梯度和大的能量贡献，从而迫使系统发生运动以降低自己的能量。于是，两个 Kink 孤子分开。对于具有相反旋转性的两个初始 Kink 孤子随时间的演化则没有出现这种变化。相反，在它们相互接近时便降低了自己的能量。于是，两个不同旋转性的 Kink 孤子彼此接近。则由这个 SG 方程描述的两个微观粒子(孤子)的相互作用过程也很类似于非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子与经典粒子的情况。因此，SG 方程描述的微观粒子具有粒子的特性。

Rubinstein 还以解析的形式讨论了这种相互作用。他把参与这种相互作用的若干 Kink 孤子表示为

$$\phi(x, t) = \phi'(x, t) + \sum_{i=1}^n \phi_i(x, t) \quad (3.142)$$

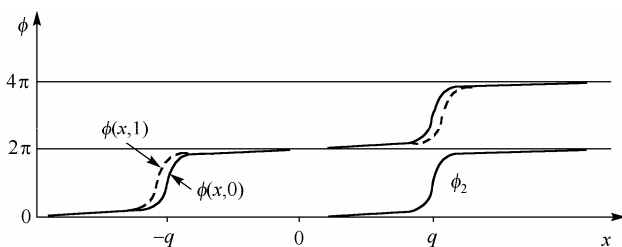


图 3.5 两个 Kink 孤子之间的相互作用。两个 $N=1$ 的 Kink 初始时处在 $x = -q$ 以及 $x = q$ 处。在 $t > 0$ 时，它们分别运动到点线的位置。表示它们相互排斥

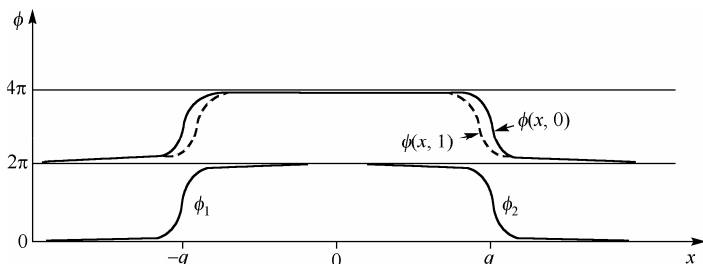


图 3.6 和图 3.5 所不同的仅是放在 $x = q$ 处的 Kink 现改为反

Kink ($N_2 = -1$)，于是 Kink 与反 Kink 之间有吸引作用

这里有
$$\phi_i(x, t) = 4 \arctan \left\{ \exp \left[\frac{m \delta_i (x - v_i t - x_i(0))}{\sqrt{1 - v_i^2}} \right] \right\} \quad \delta_i = \pm 1 \quad (3.143)$$

和 $\phi'(x, t) \square 1$ 。事实上，由于 $v_i = \partial_t \phi'(x, 0) = \phi'(x, 0) = 0$ ，则这一个解能决定在 $t = 0$ 时处于静止状态下的每个 Kink 孤子所受到的力的强度和方向。这里仅研究 $n = 2$ 时的情况，并设 $-x_1 = x_2 = q$ ，将式 (3.142) 代入式 (3.133)，在 $t = 0$ 时 Rubinstein 得到

$$\begin{aligned} \frac{1}{m^2} \partial_t^2 \phi'(x, 0) &= \sum_i \sin \phi_i - \sin \left(\sum_i \phi_i \right) \\ &= -4 \frac{\delta_1 \sinh[m(x+q)] + \delta_2 \sinh[m(x-q)]}{\cosh^2[m(x+q)] \cosh^2[m(x-q)]} \end{aligned} \quad (3.144)$$

在图 3.5 和图 3.6 中用实线和点线分别图示出了 $\phi(x, 0) = \phi_1(x, 0) + \phi_2(x, 0)$ 和 $\phi(x, t) \approx \phi(x, 0) + \partial_t^2 \phi(x, 0) t^2 / 2$ (t 是小数) 的状态。图中表明在 $\delta_1 = \delta_2$ 时，两个 Kink 是排斥，在 $\delta_1 = -\delta_2$ 时是吸引。其中 $\delta_1 = \delta_2 = -1$ 和 $-\delta_1 = \delta_2 = +1$ 的情况相当于在图 3.5 和图 3.6 中做变换 $\phi \rightarrow -\phi$ 后的结果。如果 $q \square 1/m$ 和 $x \approx q$ 时，从式 (3.144) 可得 $\phi_2(x)$ 的变化为

$$\frac{1}{m^2} \partial_t^2 \phi'(x, 0) \approx \frac{-4 \delta_1 \sinh[m(x+q)]}{\cosh^2[m(x+q)] \cosh^2[m(x-q)]} \approx \frac{-8 \delta_1 e^{-2mq}}{\cosh[m(x-q)]} \quad (3.145)$$

从式 (3.143) 可得到通过 q 的小变化后， $\phi_2(x, 0)$ 所产生的变化(刚性位移)为

$$\delta \phi_2 = \frac{\partial \phi_2(x, 0)}{\partial q} \delta q = \frac{-2 \delta_2 m}{\cosh[m(x-q)]} \delta q \quad (3.146)$$

它随时间的变化表示为
$$\partial_t^2 (\delta \phi_2) = \frac{-2 \delta_2 m}{\cosh[m(x-q)]} \delta \ddot{q} \quad (3.147)$$

在 $x \approx q$ 时，比较式 (3.145) 和式 (3.147) 可以看出，由于相互作用，这些微观粒子 (Kink) 倾向于彼此接触。此时，作用在孤子上的力为

$$(\delta m)(\delta \ddot{q}) \approx 32 m^2 \delta_1 \delta_2 e^{-m(2q)} \quad (3.148)$$

这个公式很类似于在经典物理中粒子受到外力作用后的运动规律。这也再次证明由 SG 方程描述的微观粒子具有粒子的特性。

3.8.5 非线性Daric方程

在线性量子力学中的 Daric 方程为 $\phi = (c\hat{\alpha} \cdot \hat{p})\phi + mc^2\beta\phi$ ，但在非线性量子力学中，在相对论下的非线性 Daric 方程则变成

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = (c\hat{\alpha} \cdot \hat{p})\phi + mc^2\beta\phi + b|\phi|^2\phi \quad (3.149)$$

相应的矩阵方程为

$$\begin{pmatrix} i\hbar\dot{\phi}_1 \\ i\hbar\dot{\phi}_2 \\ i\hbar\dot{\phi}_3 \\ i\hbar\dot{\phi}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} mc^2 & 0 & cp_x & c(p_x - ip_y) \\ 0 & mc^2 & c(p_x + ip_y) & cp_x \\ cp_x & c(p_x - ip_y) & -mc^2 & 0 \\ c(p_x + ip_y) & cp_x & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} + \frac{b}{4} \begin{pmatrix} \phi_1^* & \phi_2^* & \phi_3^* & \phi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ \phi_3 \\ \phi_4 \end{pmatrix}$$

将它写成方程组的显式形式，则为

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{\phi}_1 &= mc^2\phi_1 - cp_x\phi_2 + c(p_x - ip_y)\phi_4 + 4\gamma|\phi_1|^2\phi_1 \\ i\hbar\dot{\phi}_2 &= mc^2\phi_2 - c(p_x - ip_y)\phi_3 + cp_x\phi_4 + 4\gamma|\phi_2|^2\phi_2 \\ i\hbar\dot{\phi}_3 &= -mc^2\phi_3 + cp_x\phi_1 + c(p_x - ip_y)\phi_2 + 4\gamma|\phi_3|^2\phi_3 \\ i\hbar\dot{\phi}_4 &= -mc^2\phi_4 + cp_x\phi_2 + c(p_x - ip_y)\phi_1 + 4\gamma|\phi_4|^2\phi_4 \end{aligned} \quad (3.150)$$

我们感兴趣的是这组非线性方程是否有孤子解？如果有解，又如何求？这些问题值得深入研究。但在 Dirac 矩阵表示式中，对于 $(\mu=1, 2, 3, 4)$ 具有立方非线性作用的项的非线性 Dirac 方程 $\gamma_\mu \frac{\partial \phi}{\partial x_\mu} - b^2 \gamma_\mu \gamma_\nu \phi (\phi^* \gamma_\mu \gamma_\nu \phi) = 0$ ，Heisenberg 得到有过如下的单孤子解：

$$\phi_\lambda = \frac{\gamma_s \gamma_\lambda}{b} \sqrt{\frac{A}{2\hbar}} \operatorname{sech} \left(\frac{A}{\hbar} \gamma_\mu \gamma_\nu \right) \exp \left(\frac{i}{\hbar} \xi - \frac{A}{2\hbar} \gamma_\mu \gamma_u \right)$$

式中， $A = i\gamma_\mu \frac{\partial \xi}{\partial x_u}$ ； $\xi = x - u(x)t$ 。

该孤子解的特点同样也是一个十分令人感兴趣的问题。

3.9 非线性量子力学是量子力学发展的必然结果

从宏观量子效应的实验结果出发,在线性量子力学的基础上,庞小峰提出了非线性量子力学的基本原理,给出了非线性量子系统中的微观粒子的波函数和相应的动力学方程及相应理论,建立起了非线性量子力学等。能够证明这种理论是量子力学发展的必然结果。现在来说明这个问题。

3.9.1 量子力学中的微观粒子的非局域性

正如在第1章中描述的那样,在线性 Schrödinger 方程中只有动能项 $\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi$ 能决定粒子的本性,而外势场 $V(\vec{r}, t)$ 仅影响它的状态。如在 $V(\vec{r}, t) = 0$ 或常数时,它的解为一个平面波式(1.13)。其本征能量

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \infty < p_x < \infty, -\infty < p_y < \infty, -\infty < p_z < \infty \quad (3.151)$$

是一个连续谱。此时微观粒子弥散于整个空间。显然,这是由于在此种情况下粒子的状态仅由动能决定造成的。如果现在把这一粒子限制在一个长、宽、高分别为 a, b, c 的小盒子中时,在 $V(\vec{r}, t) = 0$ 时,式(1.12)的解是一个驻波。即

$$\psi(x, y, z) = A \sin\left(\frac{n_1 \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi y}{b}\right) \sin\left(\frac{n_3 \pi z}{c}\right) e^{-iEt/\hbar} \quad (3.152)$$

其本征能量是量子化的,即

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2} \right)$$

相应的动量也是量子化的。但此时粒子仍充满整个盒子,即使盒子非常小,也不可能局域。

如果让粒子处在与一个时间无关的保守力场中[即 $V(\vec{r}) \neq 0$],则在一维时,微观粒子满足定态 Schrödinger 方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi' + V(x) \psi' = E \psi'$$

式中,

$$\psi'(x, t) = \psi'(x) e^{-iEt/\hbar}$$

对于外势场 $V(x) = ax$,例如带电粒子处在电场及重力场中的运动情况,这里 a 是与坐标 x 无关的常数。在一维均匀电场中, $V(x) = -eE'x$,则上式的解为

$$\psi' = A\xi^{1/2} H_{1/3}^{(1)}\left(\frac{2}{3}\xi^{3/2}\right) \quad \xi = \frac{x}{l} + \lambda \quad (3.153)$$

式中, $H^{(1)}(x)$ 是第一类汉克尔函数; A 是归一化常数; $\xi = \frac{x}{l} + \lambda$; l 是特征长度; λ 是无量纲量。在 $\xi \rightarrow \infty$ 时, 仍有一波动存在, $\psi'(\xi) = A\xi^{-1/4} e^{-2\xi^{3/2}}/3$ 。这表明此时粒子仍不能被局域。

如果 $V(x) = ax^2$ (即谐振子情况), 在一维情况下的定态动力学方程为

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi' = E\psi'(x)$$

其解为

$$\psi'_n(x) = N_n e^{-\frac{1}{2}a^2 x^2} H_n(ax) \quad (3.154)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

此时粒子也不是局域的, 因为在 $x \rightarrow \infty$ 时, 其波函数仍不能为零。这些研究表明, 无论外势场 $V(r)$ 采取什么形式, 由式 (1.12) 决定的解都不是局域的。于是, 在线性量子力学中微观粒子仅具有波动性, 而无粒子特性可言。这与由单缝和双缝衍射等实验得到的微观粒子具有波-粒二象性不符合。详细地考察式 (1.12) 的物理含义时, 不难发现它缺少一个反映粒子与另一个粒子或该粒子与一背景场等的相互作用项。实际上, 这些相互作用对任何微观粒子都是存在的, 但在线性量子力学中经常是把它简化为一个外势场, 并进一步把它当做一个平均场或周期外势场等来处理。于是一个复杂系统便简化到了能用线性 **Schrödinger** 方程求解的地步。对于十分复杂的多体多粒子系统的处理也是如此。这样做虽然简化了所研究的这种复杂系统, 但却抹杀掉了对粒子本性有影响的诸多因素。这是不应当的。因此, 线性量子力学理论的本质就是线性化和简单化。在此理论下, 粒子永远以波运动, 而不能局域。

3.9.2 非线性作用使粒子局域

如果认真考察粒子与粒子, 或粒子与背景场等之间的真正相互作用, 会发现这些粒子总是受到一种非线性相互作用, 则式 (1.12) 变成式 (3.2) 中的非线性 **Schrödinger** 方程, 微观粒子的状态就会发生根本性的变化。现在考察非线性相互作用的效果。

当 $V(x, t) = 0$ 和 $b = \text{常数}$ (即仅考虑粒子之间的自相互作用) 时, 粒子运动的规律不再满足式 (1.13) 或式 (3.152), 在一维情况下式 (3.2) 应为

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi + b|\phi|^2 \phi = 0 \quad (3.155a)$$

$$\text{上式可表成为} \quad i\phi_{t'} + \phi_{x'x'} + b|\phi|^2 \phi = 0 \quad (3.155b)$$

式中, $x' = x/\sqrt{\hbar^2/2m}$; $t' = t/\hbar$ 。现在假设方程式(3.155b)具有以下形式的解:

$$\phi(x', t') = \varphi(x', t') e^{i\theta(x', t')}$$

将上式代入式(3.155b), 可得

$$\begin{aligned} \varphi_{x'x'} - \varphi\theta_{t'} - \varphi\theta_{x'}^2 - b\varphi^2\varphi &= 0 \quad b > 0 \\ \varphi\theta_{x'x'} + 2\varphi_{x'}\theta_{x'} + \varphi_{t'} &= 0 \end{aligned}$$

现让 $\theta = \theta(x' - v_e t')$, $\varphi = \varphi(x' - v_e t')$, 则上面两个方程变成

$$\begin{aligned} \varphi_{x'x'} + v_e \varphi\theta_{x'} - \varphi\theta_{x'}^2 - b\varphi^3 &= 0 \\ \varphi\theta_{x'x'} + 2\varphi_{x'}\theta_{x'} - v_e \varphi_{x'} &= 0 \end{aligned}$$

对于某一较小时刻 t' , 可对以上两个式子中的后式积分。其后, 可得

$$\varphi^2(2\theta_{x'} - v_e) = A(t')$$

现让积分常数 $A(t') = 0$, 则可得 $\theta_{x'} = v_e/2$, 再将它代入上面两式的前式并积分,

可得

$$\int_{\varphi_0}^{\varphi} \frac{d\varphi}{\sqrt{Q(\varphi)}} = x' - v_e t'$$

式中, $Q(\varphi) = -b\varphi^4/2 + (v_e^2 - 2v_e v_e')\varphi^2 + c'$ 。

当 $c' = 0$, $v_e^2 - 2v_e v_e' > 0$ 时, 除有 $\varphi_0 = 0$ 的解存在外, 则还有 $\varphi = \pm \varphi_0$ 的解, 这里 $\varphi_0 = [(v_e^2 - 2v_e v_e')/2b]^{1/2}$, 后者是 $Q(\varphi) = 0$ 的根。利用以上关系, 可得方程式(3.155b)的解为

$$\varphi(x', t') = \varphi_0 \operatorname{sech} \left[\sqrt{\frac{b}{2}} \varphi_0 (x' - v_e t') \right]$$

最后可以把式(3.155a)的解写成

$$\phi(x, t) = A_0 \operatorname{sech} \left\{ \frac{A_0 \sqrt{mb}}{\hbar} [(x - x_0) - v_e' t] \right\} e^{imv_e' [(x - x_0) - v_e' t]/\hbar} \quad (3.156)$$

式中, $A_0 = \sqrt{\frac{(v_e'^2 - 2v_e' v_e')m}{b}}$ 。Zakharov 等人曾用反散射法求出过此方程的孤子解, 但他们求出的解的形式不同于式(3.156)。

此解与式(1.13)迥然不同，它是一种波包型的孤立波。其包络波为

$$A_0 \operatorname{sech} \left\{ \frac{A_0 \sqrt{bm}}{\hbar} [(x - x_0) - v'_e t] \right\}$$

式中， v'_e 为在 (x, t) 坐标系中包络波的群速度，载波为谐波 $\exp\{imv'_e[(x - x_0) - v'_e t]/\hbar\}$ ，其相速度在 (x, t) 坐标系中为 v'_e (如图3.7所示)。此种孤立波在空间传播时，在所有时间内，波形和速度都不会改变，也不会弥散。这就是说，非线性相互作用项使式(1.13)的线性平面波发生畸变为一个“前无古人，后无来者”的孤单单的稳定孤立波-孤子，显示出能量的聚集和粒子的局域性，其局域在 x_0 处，这也是它的质心位置。从而表现出明显的粒子性。这种性质是不随外势场的改变而变化的。例如，在 $V(x) = C = \text{常数}$ 时，在 $A(\phi) = 0$ 时，式(3.2)的解也是一个孤立波

$$\phi = \sqrt{\frac{2\beta}{b}} \operatorname{sech} \left\{ \sqrt{\beta} [(x' - x'_0) - v_e (t' - t'_0)] \right\} \exp \left\{ i \frac{v_e}{2\hbar} \left[(x' - x'_0) - \left(\beta - \frac{v_e^2}{4} - C \right) t' \right] \right\} \quad (3.157)$$

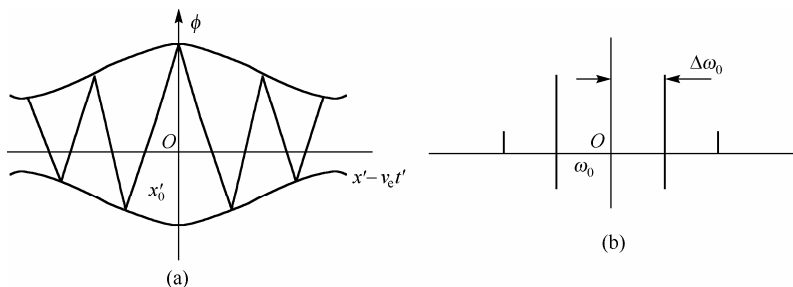


图 3.7 Schrödinger 方程的孤立波

它与式(3.156)的孤子解类似，仍是一个波包型的孤立波，即一个包络孤波被一个载波载着一起运动。因此它具有明显的粒子性。

如果再改变外势场的形式为 $V = ax'$ 时，按照式(2.37)~式(2.54)给出的求解方法，或做变换： $\phi(x', t') = \phi'(\hat{x}, \hat{t})e^{-i\alpha\hat{x}\hat{t} - i\alpha^2\hat{t}^3/3}$ ， $x' = \hat{x} - \alpha\hat{t}^2 = \sqrt{2m}(x/\hbar)$ ， $t' = \hat{t} = t/\hbar$ ， α 为一常数，在 $A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)就能变成了 $i\phi'_t + \phi'_{xx} + b|\phi'|^2\phi' = 0$ 。当选择 $b = 2$ 时，很容易求出此种情况的孤子解为

$$\phi = 2\eta \operatorname{sech} \left\{ 2\eta(x' + 2\alpha t'^2 - 4\xi t' - x'_0) \right\} \exp \left\{ -i[2(\xi - \alpha t')x' + 4\alpha^2 t'^3/3 - 4\alpha\xi t'^2 + 4(\xi^2 - \eta^2)t' + \theta_0] \right\} \quad (3.158)$$

这也是与式(3.156)有基本相同性质的波包型孤子，只是其相位和振幅有所不同，并与粒子的速度和位置及时间相关。但此解与式(3.153)完全不同。

如果再改变外势场，使 $V(x) = kx^2 + A(t)x + B(t)$ 时，则式(3.2)在 $A(\phi) = 0$ 时，庞小峰求出了它的解，可写成

$$\phi = \varphi(x - u(t))e^{i\theta(x, t)} \quad (3.159)$$

$$\begin{aligned} \text{式中, } \quad \varphi(x-u(t)) &= \sqrt{\frac{2B}{b}} \operatorname{sech}(ax-u(t)), \quad u(t) \equiv 2\cos(2\sqrt{k}t + \beta) + u_0(t) \\ \theta(x,t) &= \left[-2\sqrt{k} \sin(2\sqrt{k}t + \beta) + \frac{u_0}{2} \right] x + \lambda_0 t - \\ &\quad \int_0^t \left\{ \left[-k(2\cos(2\sqrt{k}t' + \beta) + u_0(t'))^2 + B(t') + \left[-2\sqrt{k} \sin(2\sqrt{k}t' + \beta) + \frac{u_0}{2} \right] \right\} dt' + \theta_0 \end{aligned}$$

如果 $A(t) = B(t) = 0$, 并设 $V(x') = \alpha^2 x'^2$, 则 Chen 和 Liu 等人求得其孤子解为

$$\begin{aligned} \phi &= 2\eta \operatorname{sech} \left\{ 2\eta x' - \frac{4\xi\eta}{\alpha} \sin[2\alpha(t' - t'_0)] \right\} \square \\ &\quad \exp \left\{ i \left[2\xi x' \cos 2\alpha(t' - t'_0) - \frac{\xi^2}{\alpha} \sin 4\alpha(t' - t'_0) + 4\eta^2(t' - t'_0) + \theta'_0 \right] \right\} \quad (3.160) \end{aligned}$$

它们仍是一个波包型孤子解。但此孤子以一个正比于 k 的频率振荡。显然, 它是不同于在线性量子力学中的上述色散波解式 (3.154)。在其他外势场下, 方程式 (3.2) 也有孤子解。这些结果告诉我们一个事实, 如果计算粒子之间或粒子与背景场之间的非线性相互作用, 则粒子始终是一个孤子, 即它是局域的。不论外势场如何变化, 微观粒子的局域性不会改变, 外势场仅引起了孤子的状态变化。于是微观粒子现出我们所希望的局域特性, 其原因是, 能使波发生畸变的非线性作用抑制或阻止了由动能项引起的色散效应。如果它们能相互平衡, 则局域的微观粒子是十分稳定的。

从线性量子力学中微观粒子运动的基础上, 我们考虑了粒子之间的非线性作用, 用非线性量子力学理论研究了微观粒子的特点。发现在此种情况下, 微观粒子被局域, 具有波-粒二象性, 明显不同于在线性量子力学中微观粒子的特性。由于非线性相互作用总是存在于物理系统中, 由此可以得出非线性量子力学是量子力学发展的必然结果。

3.10 非线性量子力学的正确性和普适性

在建立起了非线性量子力学基本原理和理论, 并研究和得出了它的一些特点和结果之后, 所遇到的一个关键问题是这个理论是否正确。只有正确的、自洽的、完备的和能被实验证实的理论才能使人们相信和肯定, 使大家公认。但又如何去评价一个理论的正确与否呢? 一般来讲, 包括以下内容。此理论的建立是否有必要, 是否有坚实的实验和理论基础, 是否能反映客观存在的物理现实, 是否能给出一些新的结果, 是否具有理论的自洽性(包括此理论体系中的一致性和与线性量子力学的自洽性), 所得到的结果是否能被一些实验所证实, 整个理论是否系统、完备和符合逻辑等。至于前两项所述的必要性和建立的基础已在第 1 章和第 2 章中做过详细介绍。关于波-粒二象性的新结果已在 3.9 节给出, 并将在第 4 章和第 5 章中进一步全面阐述。本理

论中的非相对论和相对论理论之间的自洽性已在 3.8 节叙述过，而与线性量子力学的自洽性已在 3.9 节做过介绍。其理论的实验证实将在第 6 章和第 8 章中给出。而整个理论的完备性是由本书所包括的 8 章内容来具体体现的。在第 1 章~第 6 章中对理论基础、内容和特点等问题给予了全面和系统的介绍；在第 7 章和第 8 章中介绍了求解非线性量子力学问题的方法和一些具体事例，以此来证明它的成功和适用性。这些知识和内容清楚地说明所建立的非线性量子力学具有一个完整的理论体系。至于该理论是否反映了客观实际的问题，除将在下面和第 6 章详细描述不同物理系统所存在的非线性相互作用所产生的不同机理及其特性外，还将在本节中阐述非线性相互作用为什么普遍存在于所有的物理系统中。并将揭示其产生机制，还要进一步说明非线性量子力学所描述粒子是处于最稳定状态的真实粒子。同时，还要说明非线性量子力学是适合于所有物理系统的正确理论，它与线性量子力学是自洽的。后者是前者的一个特例和近似表示，只有当非线性相互作用等于零，或非线性相互作用和粒子的群速度同时趋于零的情况下，才能用线性量子力学来描述微观粒子的特性。由此可看出，本节研究的内容对于证明非线性量子力学的正确性显得特别重要。

3.10.1 局域的粒子处于能量最低态

现在考察原来线性 Schrödinger 方程中计入非线性相互作用后为什么粒子就能局域？局域了的粒子是否处于一个稳定的状态上等问题，以此来论证理论的正确性。

显然，如果设式(3.2)在 $A(\phi) = 0$ 时的定态由式(3.13)表示，其中 $\phi(x)$ 满足式(3.14)。

在一维时的式(3.14)可写成

$$\frac{\partial^2 \phi'}{\partial x^2} = -\frac{d}{d\phi'} v_{\text{eff}}(\phi') \quad (3.161)$$

$$v_{\text{eff}}(\phi') = \frac{m}{\hbar^2} \left(\frac{b}{2} |\phi'|^4 - (V - E) |\phi'|^2 \right)$$

式中， $v_{\text{eff}}(\phi')$ 与 ϕ' 的关系类似于如图 2.5 所示，即 $V > E$ 及 $V > 0$ 和 $b < 0$ 时是一个双阱势，有两个极小值，即此有效势场提供了两个基态，分别为 $\phi'_0 = \pm((V - E)/2b)^{1/2}$ 。使粒子能量不再弥散于整个空间，而是自陷成了一个孤子，局域在质心位置 x_0 处。粒子处在这两个基态的能量为 $-\frac{1}{2} \frac{(V - E)^2}{b} < 0$ 。但是如果不考虑非线性相互作用，即 $b = 0$ ，则又回到线性量子力学。此时， $\phi'(x)$ 的基态 $\phi'_0 = 0$ ，其粒子的基态能量也为零。显然，在这两种状态之间存在一个能隙，它使非线性系统中的微观粒子能量降低，所减少的能量使微观粒子束缚为局域的孤子，即所降低的能量刚好为孤子的束缚能或结合能。这完全是由于粒子受到了非线性相互作用的缘故。这就是说，微观粒子受到的非

线性相互作用能完全用来使自己束缚为一孤子。这意味着，没有这个非线性吸引相互作用能，孤子是绝对不能形成的，粒子也不可能局域。因此，可以认为非线性相互作用是微观粒子局域的必要条件。处于局域状态的粒子的能量是负的，从而处于一个稳定状态之中。这表明该理论是正确的。当 $V > 0$ ， $|V| < E$ 时，就不大可能形成这类孤子。若 $V < 0$ 时，在 $V > E$ 时也不大可能形成稳定的孤子，只有在 $|V| < |E|$ 时才有可能形成一个稳定孤子，因为此时系统可以提供两个不同的基态。由此得到，对于势垒情况，仅当 $V < E$ 时，才有可能由非线性作用与色散作用提供两个不同基态，去阻止能量的弥散，形成上述性质的稳态孤子。

但对排斥型非线性自相互作用(即 $b < 0$)，式(3.2)在 $A(\phi) = 0$ 时变为

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi - |b| |\phi|^2 \phi = V(x, t) \phi \quad (3.162)$$

一般来讲，此方程虽然不能形成与上述的孤子性质相同的孤子，但如果适当选择 $V(x, t) = V(x)$ 或常数，也可以得到 Kink 孤子解。若将定态解式(3.14)代入式(3.162)，可得

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi - |b| \phi^3 + (E - V(x)) \phi = 0 \quad (3.163)$$

当 V 与 x 无关，且 $0 < V < E$ 时，式(3.163)的解为

$$f = \frac{\sqrt{2(E-V)}}{|b|} \operatorname{th} \left[\sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} (x - x_0) \right] \quad (3.164)$$

这是 Kink 孤子，而不是上述的波包型孤子解。因此孤子的性质发生了变化。

但当 $|V| > E$ 而 $V < 0$ 时，式(3.163)也有形如式(3.164)的解。同时，还可能出现形状刚好与波包型孤子形状颠倒的暗孤子解。这种孤子在光纤中发现过。

3.10.2 局域粒子表现出来的波-粒二象性

现在讨论在 $V(x, t) = 0$ 和 $A(\phi) = 0$ 时，示于图 3.7 中的式(3.156)孤子的波-粒二象性。

如前所述，此时微观粒子的状态用一个波包型包络波和载波来表示。其包络孤立波的宽度为 $W = 2\pi\hbar/(\sqrt{mb}A_0)$ ，其振幅为 A_0 。于是，这个孤子的大小为 $A_0 W = 2\pi\hbar/\sqrt{mb}$ ，它是一个常数，与粒子的速度等无关。这表明这个孤子在时空中传播时，它的大小是不变的，从而显示出粒子的特性。由于粒子被局域，其大小又限制在 $2\pi\hbar/(\sqrt{mb}A_0)$ 的范围内，于是，它的能量也被聚集，则微观粒子变成为一个具有确定的能量、动量和质

量的粒子。可求出它们分别为 $E = E_0 + \frac{1}{2} M_{\text{sol}} v_e^2$, $P = m v_e N_s$, $N_s = 2 A_0 \hbar / \sqrt{m b}$, 即它们都是一些常数, 完全由粒子的性质决定。

从图3.7可以看出, 这个微观粒子有确定位置, 是被局域在 $x = x_0$ 的地方。所以 x_0 就是孤子的质心位置。因此在用 $\phi(\vec{r}, t)$ 或 $\phi(x, t)$ 来表示微观粒子时, 其中的位矢 \vec{r} 或位置 x 有确切的物理含义。真实地表示了微观粒子在时空中的位置。因此, 这些正是粒子的特性。

另一方面, 式(3.156)的解是一个孤子波, 同时它由载波“携带”在时空中传播, 从而具有波动性。同时, 粒子的包络波的频谱总是围绕载波频率 ω_0 分布, 呈现出一个局域结构, 展现出一个频宽 $\Delta\omega_0$ 。在图3.7中示出了包络波的 $\phi(x, t)$ 频谱宽度。由于频率是波动的一个特征, 因此, 由非线性的 Schrödinger 方程式(3.2)描述的微观粒子既具有波动性, 又具有粒子性, 即具有波-粒二象性。而图3.7和式(3.156)刚好是微观粒子所具有的这种波-粒二象性最完美的表示和体现。更使人感兴趣的是这种波-粒二象性是从非线性量子力学的基本方程自然得出的结果, 而非人为加强。这与线性量子力学迥然不同, 充分体现了非线性量子力学的成功。由式(3.156)~式(3.160)可知, 这种性质是不随外势场的变化而改变的, 是微观粒子的固有特性。这些特征也与革末和戴维孙等的单缝和双缝衍射的实验结果相吻合, 从而彻底避开量子力学的困难。

3.10.3 粒子的局域性是粒子与另一粒子或背景场之间的非线性相互作用的结果

那么, 在 $A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)中出现的非线性相互作用又从何而来呢? 或它是否反映了粒子作用的真实特性? 我们这里的研究表明只要考虑系统中每个粒子的真实运动和它们之间的相互作用, 则每个粒子必定会受到非线性相互作用。因为式(3.2)总是可以分解为两个具有相互作用的粒子或一个粒子与一个背景场的运动方程, 其中一个粒子的运动方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V(x, t) + \chi \phi \frac{\partial F}{\partial x} \quad (3.165)$$

另一个粒子或背景场的运动方程为

$$M \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right) = -\chi \frac{\partial}{\partial x} |\phi|^2 \quad (3.166)$$

表明每个粒子的运动都受到耦合相互作用的影响，即场 F 的梯度变化改变了粒子状态变化。反转过来，粒子数目的梯度变化也使场 F 的状态发生变化。这里 F 表示以速度 v_0 运动的另一粒子(如声子或背景场)的场量， χ 是粒子 ϕ 与 F 的耦合相互作用系数。就是这种耦合机制使粒子的状态随 F 场的变化而改变，其关系为

$$\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{\chi}{M(v^2 - v_0^2)} |\phi|^2 \quad (3.167)$$

将式(3.167)代入式(3.165)，可得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V(x, t) \phi - b |\phi|^2 \phi \quad (3.168)$$

式中， $b = \frac{\chi^2}{M(v^2 - v_0^2)}$ 。上式刚好就是 $A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)。这种机制适合于晶格场中粒子的运动，其中式(3.165)描述了电子、激子或极化子的运动，而式(3.166)描绘了晶格的振动和与粒子的耦合作用。在过去量子力学的处理中，总是用一个平均场或周期外势场来人为代替晶格场对粒子的作用，抹杀了晶格的固有运动，则无非线性作用出现。现考虑它的运动和粒子的相互作用，所以非线性相互作用出现。这就清楚表明非线性相互作用来源于粒子与粒子之间或粒子与背景场之间的相互作用。

微观粒子所受到的非线性相互作用也来源于另一种机理。若相互作用的两个粒子中的一个粒子的运动方程为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi + V(x, t) \phi + \chi \phi F \quad (3.169)$$

而另一个粒子或背景场的运动方程为

$$M \left(\frac{\partial^2 F}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \right) = -\chi \frac{\partial}{\partial x} |\phi|^2 \quad (3.170)$$

则这种耦合的机理也是十分清楚的，即存在的场 F 直接改变了粒子状态变化。反过来，粒子数目的梯度涨落使场 F 的状态发生变化。这里 F 表示了以速度 v_0 运动的另一个粒子或背景场的场量， χ 是粒子 ϕ 与场量 F 的耦合相互作用系数。这种耦合作用使粒子的状态随 F 场而改变的关系为

$$F = -\frac{\chi}{M(v^2 - v_0^2)} |\phi|^2 \quad (3.171)$$

将式(3.171)代入式(3.169)可得式(3.168)，这里 $b = \frac{\chi^2}{M(v^2 - v_0^2)}$ 。它也刚好就是 $A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)。这种机制也表明粒子与粒子之间或粒子与背景场之间的相互作用会引起非线性相互作用的出现。从这一研究可以看出，不管采用什么机制，非线性相互作用总是来源于粒子与粒子之间或粒子与背景场之间的相互作用。以上两种机制既可出现于固体和凝聚态物质，也可出现在多电子的原子、分子和凝合物等之中。

在现实物理世界中，只有一个微观粒子的物理系统是不存在的。最简单的氢原子也是由原子核和核外电子组成的两粒子体系，这就是说真实的物理系统都是多体多粒子系统。在这些系统中，粒子与粒子之间、粒子与背景场之间的相互作用是不可避免的，并且是始终存在的，只要把系统中的各类粒子做平等处理，考虑它们各自的运动状态和它们的真实相互作用，则这个非线性相互作用就是会存在的，尽管这个非线性相互作用有强弱之分。但是在过去的线性量子力学中总是把研究的粒子孤立出来，其余粒子的运动不再考虑，或者把它们冻结起来，或者把它们与该粒子的复杂相互作用简单地用一个平均场或周期性外场等外势场来近似处理，并线性化。显然，这不是一种真实的研究方法和结果。在多体多粒子系统中，正是它们之间的相互作用才形成了一个系统，而这种相互作用往往是非线性的，必须加以全面考虑。即使在最简单的，线性量子力学应用成功的氢或氦原子系统中也存在这种非线性相互作用。

在氢原子中，按照传统方法处理核外电子的运动时，是假设氢原子中的电子受到了一个原子核给它的库仑外势场，可表示成 $V(\vec{r}) = -e^2/\vec{r}$ 。显然，在这种表示中坐标原点是放在原子核上的，这意味着核是被冻结，认为是静止不动的。这显然不符合实际情况，因为原子核(质子)总是经常处于运动状态之中，并总和核外电子有相互作用，这包括了电子和核子之间的本身自旋和轨道运动的相互作用及它们的电荷间的库仑相互作用。在氦原子中，还包括质子和中子间的相互作用。由于核外电子总是围绕核子运动，则核子受到的这些力的方向在不断地改变，而其运动相对于自己的平衡位置也在不断变化。如果再考虑核子本身固有的零点振动，则我们就可以合理地认为该核子总是在自己的平衡位置附近做振动。若考虑原子核的这种运动状态和受到的核外电子的库仑相互作用，则就应当用一个位移量来描述这种运动状态。现设它离开平衡位置或坐标原点的距离为 \vec{u} ，于是原子核与核外电子之间的间距应改为 $\vec{r} + \vec{u}$ ，这必然引起它们之间的库仑相互作用和电子的状态变化，其库仑势现在应

表示为 $V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{\vec{r} \pm \vec{u}}$ 。由于有

$$\frac{1}{r \pm u} = \frac{1}{r(1 \pm u/r)} \square \left\{ \frac{1}{r} \left(1 \mp \frac{u}{r} + \dots \right) = \frac{1}{r} \mp \frac{u}{r^2} + \dots = \frac{1}{r} \pm \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) u + \dots \right\}$$

的关系存在, 则核外的电子的运动方程现应为

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi - \frac{e^2}{r} \phi + \chi \phi u \quad (3.172)$$

这里, 我们假设了原子核和核外电子之间的耦合系数是 $\chi = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) = -\frac{1}{r^2}$, 它的本质恰好就是它们之间的库仑相互作用力。显然, 它不能为零, 则 $\chi \phi u$ 亦不可能为零。另一方面, 由于核外电子状态的上述变化, 也必然导致作用于原子核上的库仑相互作用力的改变, 从而改变了自己原来的振动状态。则此时它的运动方程应表示为

$$M \left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = -a_0^2 \chi \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\phi|^2 \quad (3.173)$$

这里的式 (3.172) 和式 (3.173) 相当于上面的式 (3.169) 和式 (3.170), 因此可以自然地得到我们所希望的非线性 Schrödinger 方程式 (3.168) 或式 (3.2), 但是

$$b = \frac{a_0^2 \chi^2}{M(v^2 - v_0^2)} \quad (3.174)$$

这里的 a_0 是原子的玻尔半径。因此, 在原子中电子满足的非线性 Schrödinger 方程式 (3.168) [此时 $V(r) = -e^2/\bar{r}$] 和核子满足的非线性方程式 (3.173) 表征了在原子核运动时引起它们之间的相互作用变化后, 所出现的非线性相互作用导致了电子和核子运动状态的改变。在此情况下, 在氢原子系统中核外电子的正确运动方程是非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 或式 (3.168), 而不是线性 Schrödinger 方程式 (1.12)。尽管这种非线性相互作用可能很小, 但它是真实存在的。

我们能清楚地阐明方程式 (3.173) 的物理基础和写出相应的氢原子系统的哈密顿函数。由上述推导可知, 由于核子的位移改变了核与核外电子之间的距离, 导致了它们之间的库仑势的涨落变化, 这也改变了核外电子的状态和粒子数密度的分布。因此, 在核子处于不同位置时, 其相应的核外电子的状态和粒子数密度也不同,

从而核外电子的密度在空间上出现一个梯度分布, 可用 $\frac{\partial^2}{\partial x^2} |\phi|^2$ 来表示。它的这种特

性也使作用于核子上的库仑力发生变化, 则式 (3.173) 中的 $a_0^2 \chi \frac{\partial^2}{\partial x^2} |\phi|^2$ 刚好表征了这个作用于核子上的库仑力。这就是式 (3.173) 的物理意义。我们可粗略估计出核外电子所受到的这种非线性相互作用的大小。如果假设核的平均位移为 $0.01 \sim 0.005$ nm, 则可估计此非线性作用大约为库仑势的 $5\% \sim 10\%$ 。尽管它较小, 但客观存在, 应当加以考虑, 特别是在研究氢原子的精细结构时更应该这样。

这种方法也可以推广到所有原子及分子系统中。同时，由于其他原子的原子量大，其中包括了多个质子、中子和核外电子，它们的粒子密度比氢原子大，同时粒子之间的间距也很小，所以非线性相互作用一定会很强，更应当对它加以考虑。如果采用式(3.165)～式(3.167)的非线性相互作用的产生机理，则可得到在固态及所有凝聚态物质中的电子和激子及极化子等微观粒子应满足非线性 **Schrödinger** 方程式(3.168)。在这当中，由于物质不同，其中的 $V(x,t)$ 及 b 的大小和表示式有所差别。因此，非线性相互作用在所有物理系统中普遍存在。则在研究微观粒子的运动特性时，必须，而且也应当使用非线性量子力学，而不能用线性量子力学。由此可得出结论，非线性量子力学是一个普适和正确的理论，它是量子力学发展的必然结果，能真实反映和正确描绘微观粒子的特性。

3.10.4 线性量子力学是一个近似理论

另外，从以上的推导中也使我们清楚看到线性量子力学或线性 **Schrödinger** 方程仅是一个近似理论，即是非线性作用系数 $b=0$ 时的一个特例。即只有忽略其他粒子的运动和非线性相互作用时，才能使用线性量子力学来研究和揭示微观粒子的运动规律。这有助于揭示微观粒子的本质和特点。因此，我们建立的非线性量子力学不但可以推动量子力学的向前发展，同时也可以解决线性量子力学中的长期争论和一直未解的一些问题，提高人们对微观粒子的认识水平。

这个结论也可以从另一个角度来加以证实。为了清楚看出这点，现将式(3.96)或式(3.156)写成下面这种形式：

$$\phi(x',t') = 2\sqrt{2k}\text{sech}[2k(x' - x'_0 - v_e t')]e^{iv(x' - x'_0 - v_e t')/2} \quad (3.175)$$

式中， $b=1$ ； $x' = (\sqrt{2m}/\hbar)x$ ； $t' = t/\hbar$ 。在非线性作用极弱($b \ll 1$)和 $v_e t' < x$ 时，解 $\phi(x', t')$ 可写成

$$\phi(x',t') = 4\sqrt{2k}e^{-2k(x' - x'_0 - v_e t')}e^{iv(x' - x'_0 - v_e t')/2} \quad (3.176)$$

在非线性相互作用较小时，可将式(3.155b)中的 $b|\phi|^2\phi$ 项做微扰处理，用微扰方法求其解时，可发现解式(3.175)是此时的近似解，而不是线性或平面波。

当非线性作用极弱时，式(3.155)可近似为

$$i\phi_t + \phi_{xx'} \approx 0 \quad (3.177)$$

将式(3.176)代入式(3.177)可得 $v_e \sim 4k$ ，这是粒子的群速度。这表明 $\phi(x,t)$ 是很小时，即当粒子用式(3.176)来表示时，它满足式(3.177)，其中 $v_e \sim 4k$ 。

但用线性量子力学来处理时，式(3.176)是一个自由粒子满足的线性 **Schrödinger**

方程。它的解是一个平面波[如式(1.13)所示]。其色散关系为 $\omega = k^2$ ，其相速度 $\omega/k = v_c = k$ ，群速度为 $\frac{\partial \omega}{\partial k} = v_{gr} = 2k$ 。所以它不同于上面求得的 $v_c \sim 4k$ ，这是由于解式(3.177)不是一个平面波解，或者说平面波解不是非常弱非线性作用时的非线性 Schrödinger 方程的解。实际上，解式(3.175)是一个发散波(divergent wave)解。即当 $x \rightarrow \infty$ 时， $\phi(x', t') \rightarrow \infty$ 。因此它不是单纯的平面波解。从这一研究可知，孤子是由一发散波演变而来的。在线性波中，这种波解是被抛弃的。但它在非线性作用下就变成了一个振幅有限的孤立波。当非线性作用很弱时，这个孤子便会自动发散，如果要消除或压制这种发散性，就不会有孤子出现。这可从 $b \neq 1$ 时的解

$$\phi(x', t') = 2k \sqrt{\frac{2}{b}} \text{sech}[2k(x' - x'_0 - v_c t')] e^{iv(x' - x'_0 - v_c t')/2} \quad (3.178)$$

中看出。如果非线性相互作用接近于零，即 $b \rightarrow 0$ ，则孤立波发散即 $\phi(x', t') \rightarrow \infty$ 。若要想抑制这个发散，我们不得不设 $k = 0$ 。在这种情况下，由式(3.178)就变成平面波解式(1.13)。这个结果表明，即使在非线性相互作用极弱时，非线性 Schrödinger 方程或非线性量子力学也不可能退化为线性 Schrödinger 方程或线性量子力学。仅当在非线性相互作用和粒子的群速度等于零时，才能从前者退化为后者。因此，线性量子力学仅在非线性作用等于零的特殊情况下是正确的。它在非线性作用很弱时也仅能在一个限定范围内近似使用。真实的物理系统或多或少都存在非线性相互作用，因此都必须用非线性量子力学去描述微观粒子，即非线性量子力学具有普适性。

本节阐明在非线性量子力学中，由于非线性作用的存在，微观粒子处于有效势能最低的稳定状态中，其非线性作用来源于粒子与粒子之间或粒子与背景场之间的相互作用。只要我们认真考虑系统中每个粒子的真实运动和相互作用，则这种非线性作用始终存在，但是不同的系统有不同强度的非线性作用。即使在非线性作用十分微弱，例如像前面研究的氢原子中的情况下，也应该用非线性量子力学来描述，而不能用线性量子力学来研究。从这一研究再一次证实了非线性量子力学这一研究是正确的，它具有广泛的实用性，而线性量子力学仅是非线性量子力学的一种近似和特殊情况。

习题

1. 利用一个平面波解 $r_{01} = (q_{10})^ = A e^{i(k \cdot x - \omega t)}$ 在 $\Omega = -2L^{(+)}$ ， $r = q^*$ ， $\mu = \lambda^*$ 的条件下，从态的叠加公式(3.24)和式(3.23)求解出其 $P_{(22)}$ 的值。

2. 求解 $i\phi_t + \phi_{xx} + b|\phi|^2 \phi = \varepsilon \beta \phi_x$ 的微扰解。这里 ε 式一个小数， $\varepsilon \beta \phi_x$ 是一个微扰项。

3. 从 $L\phi = \lambda\phi$, 利用式(3.82)推出 Zakharov-Shabat 方程。

4. 利用式(3.118)~式(3.122)求出由氢键水分子链的振动能谱。这里的 $\omega_0 = 3784.2 \text{ cm}^{-1}$, $b = 167.2 \text{ cm}^{-1}$, $\varepsilon = 40 \text{ cm}^{-1}$ 。

5. 利用洛伦兹变换 $\begin{pmatrix} \bar{t} \\ \bar{x} \end{pmatrix} = (1-v^2)^{-1/2} \begin{pmatrix} 1-v \\ -v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ x \end{pmatrix}$ 和式(3.134)~式(3.135)求证系统的哈密顿量 H 和动量 P 的洛伦兹不变性。

6. 用 $\phi(x, t) = \varphi(x, t)e^{i\theta(x, t)}$ 关系求出其方程 $i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi + b|\phi|^2 \phi - c\phi = 0$ 的孤子解, 研究它的物理意义和解的特点。

*7. 在 b 很小的情况下, 用微扰方法分别在非线性量子力学(此时设 $i\hbar\phi_t^0 + \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{xx}^0 \approx 0$ 的解为 $\phi^0 = 4\sqrt{2/bk}\epsilon^{-2k(x-x_0-vt)}e^{i[mv(x-x_0)-Et]/\hbar}$, $E = \hbar\omega$)和线性量子力学(此时设 $i\hbar\phi_t^0 + \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{xx}^0 \approx 0$ 的解为 $\phi^0 = Ae^{i[mvx-Et]/\hbar}$)的框架内求出非线性 Schrödinger 方程 $i\hbar\phi_t + \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{xx} + b|\phi|^2\phi = 0$ 的微扰解。比较它们的差别, 研究其形成的原因。

*8. 利用反散射变换法和 Zakharov-Shabat 方程, 从式(3.28)~式(3.35)求出非线性傅里叶变换的完整关系。

第 4 章 在非线性量子力学系统中微观粒子的特性

本章研究微观粒子的质量、能量和动量等的计算及其遵守的守恒定律，在外场中粒子的稳定性，粒子的经典运动特性和满足的哈密顿方程和拉格朗日方程，粒子在界面上的反射和透射，及 **Fraunhofer** 衍射效应，以及粒子的动量和能量满足的最小测不准关系，并以此来深入阐明微观粒子的局域特性和波-粒二象性。

4.1 微观粒子具有的能量、动量和质量守恒定律

4.1.1 微观粒子的质量、能量和动量

从第 3 章知道由非线性量子力学描述的微观粒子具有波-粒二象性，或者它有粒子的特性，具有确定的质量、能量和动量等属性。现在来决定由非线性量子力学描述的微观粒子的能量、动量和质量及其守恒定律。对应于微观粒子的动力学方程式 (3.2)

在 $A(\phi) = 0$ 时的系统的哈密顿量和拉格朗日密度函数分别用式 (3.9) 和式 (3.10) 表示。

于是可将系统的粒子数密度定义为

$$\rho = |\phi|^2 \quad (4.1)$$

微观粒子的动量密度定义为

$$p = i \left[\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right] \quad (4.2)$$

粒子流密度定义为

$$j = -i \left[\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right] \quad (4.3)$$

粒子所具有的能量密度 \dot{o} 为

$$\dot{o} = \left| \frac{\partial \phi}{\partial x'} \right|^2 - \frac{b}{2} |\phi|^4 + V |\phi|^2 \quad (4.4)$$

非线性 **Schrödinger** 方程式 (3.2) 在 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 时的形式，即式 (3.155) 的解

由庞小峰和 **Zakharov** 等人分别用变量变换和反散射方法求出，其解为式 (3.95) 或式 (3.156)。它是一个非拓扑型波包孤子解，如图 3.7 所示。正如第 3 章所分析的，它是微观粒子波-粒二象性有机相关和统一的极好表示式。这表明在该系统中的微观粒

子是具有一个质心，并局域于 x_0 的孤子。它有确定的能量、动量和质量。从以上粒子数或质量密度、动量密度和能量密度的定义，由式 (3.156) 能求出此微观粒子的能量、动量和质量在 (x, t) 坐标系中分别为

$$M_{\text{sol}} = N_s = \int |\phi|^2 dx = \frac{2A_0\hbar}{\sqrt{mb}}, \quad P = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi^* \phi_x - \phi \phi_x^*) dx = 2mv_e N_s$$

$$E = \int \left[\frac{\hbar^2}{2m} |\phi_x|^2 - \frac{b}{2} |\phi|^4 \right] dx = E_0 + \frac{1}{2} M_{\text{sol}} v_e^2$$

式中， E_0 是微观粒子的静止能量。由此看来，这些微观粒子都具有确定的能量、动量和质量。同时，在未受外势场作用时，其动量和能量都由粒子的群速度 v_e 决定。在以此群速度的运动中，粒子能量、动量和质量始终不改变，其大小完全由粒子的基本属性决定，并是与时间无关的常数。这意味着粒子的大小或体积不是随时间变化，这正是粒子特征的表现。而这和线性量子力学微观粒子迥然不同，并很类似于宏观粒子。因此不再弥散于整个空间，而具有明显的粒子特性。

4.1.2 微观粒子具有的能量、动量和质量守恒定律

对于在 $A(\phi)=0$ 的式 (3.2)，从式 (4.1) ~ 式 (4.4) 可求得

$$\frac{\partial \rho}{\partial t'} = \frac{\partial j}{\partial x'} \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial x'} \left[2 \left(\frac{\partial \phi}{\partial x'} \right) b |\phi|^4 + 2V |\phi|^2 - \left(\phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + \phi \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x'^2} \right) + 2iV \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right) \right] \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial x'} \left[p\rho + i \left(\frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} - \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial x'^2} \right) - i \left(\phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} - \phi \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right) \right] \quad (4.7)$$

利用在 $A(\phi)=0$ 的式 (3.2) 可得

$$\begin{cases} \frac{\partial M}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t'} \int \rho dx' = 0 & M = \text{constant} \\ \frac{\partial P}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t'} \int p dx' = 0, & \frac{\partial E}{\partial t'} = \frac{\partial}{\partial t'} \int \dot{\phi} dx' = 0 \end{cases} \quad (4.8)$$

它们分别表示质量、动量和能量守恒。这就是说，在非线性相互作用存在的非线性量子系统中的微观粒子和其他物质一样，遵守普遍的物质运动定律。

当 V 为一个常数时，微观粒子具有质量、动量和能量分别为

$$M_s = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx' = \frac{2A_0\hbar}{\sqrt{mb}} = N_s, \quad P = mv_e N_s$$

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|^2 - \frac{b}{2} |\phi|^4 + V |\phi|^2 \right] dx' = E_0 + VN_s + \frac{1}{2} M_s v_e^2$$

即它的能量由粒子的动能、束缚能和相互作用能组成。

当然,一些微观粒子也具有一定的电荷、自旋等基本特征。因此,由非线性量子力学描述的对象具有物质的一般属性。

4.1.3 非线性Schrödinger方程相关的Noether原理决定的一些守恒定律

实践证明,由非线性 Schrödinger 方程式(3.2)描述的微观粒子,除具有以上守恒定律外,还存在多个守恒定律。后者可从与非线性 Schrödinger 方程相关的 Noether 定理,在不同变换群下的系统作用量的不变性中推导出来。现在,首先给出由 Gelfand, Fomin 和 Bulman Kumei 等人(参见 C. Sulem 和 P. L. Sulem 的书和其中的参数文献)建立的与非线性 Schrödinger 方程式(3.2)在 $A(\phi) = 0$ 时相关的 Noether 原理。

为了简化计算,在这里引入以下的表示 $\bar{\xi} = (t', x') = (\xi_0, \xi_1, \dots, \xi_a)$, $\partial_0 = \partial_{t'}$, $\partial = (\partial_0, \partial_1, \dots, \partial_d)$ 和 $\Phi = (\Phi_1, \Phi_2) = (\phi, \phi^*)$, 这里 $x' = x\sqrt{2m}/\hbar$, $t' = t/\hbar$ 。

根据非线性 Schrödinger 方程式(3.2) [在 $A(\phi) = 0$ 时]所对应的拉格朗日密度函数

$L = L'$ 的式(3.10), 能够将系统的作用量表示为

$$S\{\phi\} = \int_{t_0}^{t_1} \int L'(\phi, \nabla \phi, \phi_t, \phi^*, \nabla \phi^*, \phi_t^*) dx' dt' \quad \text{或} \quad S\{\phi\} = \int_D \int_{x'}^{+\infty} L'(\Phi, \partial \Phi) d\bar{\xi} \quad (4.9)$$

在依赖于小参量 ε 的变换 T^ε 下, 则上述量有变换

$$\bar{\xi} \rightarrow \tilde{\xi}(\bar{\xi}, \Phi, \varepsilon), \quad \Phi \rightarrow \tilde{\Phi}(\bar{\xi}, \Phi, \varepsilon)$$

式中, $\tilde{\xi}$ 和 $\tilde{\Phi}$ 是被假设为对于 ε 是可微分的。当 $\varepsilon = 0$ 时, 其变换退化为么正变换。对于一个无穷小的 ε , 则有 $\tilde{\xi} = \bar{\xi} + \delta \bar{\xi}$, $\tilde{\Phi} = \Phi + \delta \Phi$ 。在变换 T^ε 下, 则有 $\Phi(\bar{\xi}) \rightarrow \tilde{\Phi}(\tilde{\xi})$ 的变化, 而积分区域 D 变成 \tilde{D} , 其作用量为

$$S\{\phi\} \rightarrow \tilde{S}\{\tilde{\phi}\} = \int_{\tilde{D}} \int_{x'}^{+\infty} L'(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial} \tilde{\Phi}) d\tilde{\xi}$$

式中, $\tilde{\partial}$ 表示了相对于 $\tilde{\xi}$ 的微分。在 ε 的一阶极限变换下, 其变化 $\delta S = \tilde{S}\{\tilde{\phi}\} - S\{\phi\}$ 可写成

$$\delta S = \int_D \int_{x'}^{+\infty} [L'(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}) - L'(\Phi, \partial\Phi)] d\bar{\xi} + \int_D \int_{x'}^{+\infty} L'(\Phi, \partial\Phi) \sum_{v=0}^d \frac{\partial \delta \bar{\xi}_v}{\partial \bar{\xi}_v} d\bar{\xi} \quad (4.10)$$

此处使用了 Jacobian 展开近似: $\frac{\partial(\tilde{\xi}_0, \dots, \tilde{\xi}_d)}{\partial(\bar{\xi}_0, \dots, \bar{\xi}_d)} = 1 + \sum_{v=0}^d \frac{\partial \delta \bar{\xi}_v}{\partial \bar{\xi}_v}$ 。在上式右边的展开式中的

的第二项 $L'(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi})$ 是用 $L'(\Phi, \partial\Phi)$ 代替的。现定义

$$\begin{aligned} \delta \tilde{\Phi}_i &= \tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) - \Phi_i(\bar{\xi}) = \partial_v \Phi_i \delta \bar{\xi}_v + \delta \Phi_i(\bar{\xi}) \\ \tilde{\partial}_v \tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) - \partial_v \Phi_i(\bar{\xi}) &= (\tilde{\partial}_v - \partial_v) \tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) + \partial_v [\tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) - \Phi_i(\bar{\xi})] \end{aligned} \quad (4.11)$$

式中,

$$\partial_v = \frac{\partial \bar{\xi}_\mu}{\partial \bar{\xi}_v} \tilde{\partial}_\mu = \left(\delta_{v\mu} + \frac{\partial \delta \bar{\xi}_\mu}{\partial \bar{\xi}_v} \right) \tilde{\partial}_\mu = \tilde{\partial}_v + \frac{\partial \delta \bar{\xi}_\mu}{\partial \bar{\xi}_v} \tilde{\partial}_\mu$$

则有

$$\begin{aligned} L'(\tilde{\Phi}, \tilde{\partial}\tilde{\Phi}) - L'(\Phi, \partial\Phi) &= \frac{\partial L'}{\partial \Phi_i} [\tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) - \Phi_i(\bar{\xi})] + \frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} [\tilde{\partial}_v \tilde{\Phi}_i(\bar{\xi}) - \partial_v \Phi_i(\bar{\xi})] \\ &= \frac{\partial L'}{\partial \Phi_i} \delta \Phi_i + \partial_\mu (L' \delta \bar{\xi}_\mu) - L' \frac{\partial \delta \bar{\xi}_v}{\partial \bar{\xi}_v} + \partial_v \left[\frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \delta \Phi_i - \partial_\mu \left[\frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \right] \delta \Phi_i \right] \end{aligned}$$

于是式(4.10)现用

$$\delta S = \int_D \int_{x'}^{+\infty} \left\{ \frac{\partial L'}{\partial \Phi_i} - \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[\frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \right] \right\} \delta \Phi_i d\bar{\xi} + \int_D \int_{x'}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[L' \delta \bar{\xi}_v + \frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \delta \Phi_i \right] d\bar{\xi} \quad (4.12)$$

代替, 在此推导中使用了关系

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} (L' \delta \bar{\xi}_v) &= L' \frac{\partial \delta \bar{\xi}_v}{\partial \bar{\xi}_v} + \frac{\partial L'}{\partial \Phi_i} \partial_v \Phi_i \delta \bar{\xi}_v + \frac{\partial^2 L'}{\partial (\partial_\mu \Phi_i)} \partial^2_{v\mu} \Phi_i \delta \bar{\xi}_v \\ \frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \partial_v \int_{x'}^{+\infty} \delta \Phi_i &= \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[\frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \delta \Phi_i \right] - \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[\frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \delta \Phi_i \right] \delta \Phi_i \end{aligned}$$

使用 Euler-Lagrange 方程, 则在 δS 的表示式右边第一项趋于 0, 于是可得到 Noether 定理, 即

① 如果作用量式(4.9)在独立和相关的变量做无穷小变换

$$\phi \rightarrow \phi + \delta\phi, \quad \bar{\xi} \rightarrow \bar{\xi} + \delta\bar{\xi}$$

下是不变的, 这里 $\bar{\xi} = (t, x_1, \dots, x_d)$, 利用上面定义的 $\tilde{\Phi}$, 则下列守恒定律成立:

$$\frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[L' \delta \bar{\xi}_v - \frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \delta \Phi_i \right] = 0 \quad \text{或} \quad \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}_v} \left[L' \delta \bar{\xi}_v + \frac{\partial L'}{\partial (\partial_v \Phi_i)} \left(\delta \Phi_i - \frac{\partial \Phi_i}{\partial \bar{\xi}_\mu} \delta \bar{\xi}_\mu \right) \right] = 0 \quad (4.13)$$

② 如果在无穷小变换

$$t' \rightarrow \bar{t}' = t' + \delta t' (x', t', \phi), \quad x' \rightarrow \bar{x}' = x' + \delta x' (x', t', \phi)$$

$$\phi(x', t') \rightarrow \bar{\phi}(\bar{t}', \bar{x}') = \phi(t', x') + \delta \phi(t', x')$$

下其作用量是不变的, 则

$$\int \left[\frac{\partial L'}{\partial \phi_{i'}} (\partial_{i'} \phi \delta t' + \nabla \phi \cdot \delta \bar{x}' - \delta \phi) + \frac{\partial L'}{\partial \phi_{i'}^*} (\partial_{i'} \phi^* \delta t' + \nabla \phi^* \cdot \delta \bar{x}' - \delta \phi^*) - L' \delta t' \right] dx'$$

是一个守恒量。

对于在 $A(\phi) = 0$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2), 从式 (4.13) 可以得到

$$\frac{\partial L'}{\partial \phi_{i'}} = \frac{i}{2} \phi^*, \quad \frac{\partial L'}{\partial \phi_{i'}^*} = -\frac{i}{2} \phi$$

式中, $L' = L$ 是式 (3.10)。于是以下的几个守恒定律便可从以上的 Noether 定理得出。

(1) 在时间平移的不变性和能量守恒定律

做时间平移变换: $t' \rightarrow t' + \delta t'$, 若 $\delta x' = \delta \phi = \delta \phi^* = 0$, 于是作用量式 (4.9) 是不变的, 则式 (4.13) 变成

$$\partial_{i'} \left[\nabla \phi \cdot \nabla \phi^* - \frac{b}{2} (\phi \phi^*)^2 + V(x', t') \phi^* \phi \right] - \nabla \cdot (\phi_{i'} \nabla \phi^* + \phi_{i'}^* \nabla \phi) = 0$$

这结果可导致能量守恒, 即

$$E = \int \left(\nabla \phi \cdot \nabla \phi^* - \frac{b}{2} (\phi \phi^*)^2 + V(x', t') \phi^* \phi \right) dx' = \text{constant} \quad (4.14)$$

(2) 相移不变性或规范不变性和质量守恒定律

做相移变换 $\bar{\phi} = e^{i\theta} \phi$ 时, 上式的作用量是不变的, 则对于给定的无穷小所引起的, 在 $\delta t' = \delta x' = 0$ 时可表示为 $\delta \phi = i\theta \phi$ 。由此从式 (4.13) 可以推出

$$\partial_{i'} |\phi|^2 + \nabla \cdot \left\{ \frac{i}{2} (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \right\} = 0$$

于是, 便可导致质量或粒子数守恒, 即

$$N_s = \int |\phi|^2 dx' = \text{constant}$$

和连续性方程

$$\frac{\partial N_s}{\partial t'} = \nabla \cdot \bar{j} \quad (4.15)$$

成立, 这里 \bar{j} 是质量流密度可写成 $\bar{j} = -i(\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi)$ 。

(3) 空间平移不变性和动量守恒定律

如果在一个无穷小的空间变换 $x' \rightarrow x' + \delta x'$ (此时有 $\delta t = \delta \phi = \delta \phi^* = 0$) 下, 若其作

用量是不变的，则从式(4.13)可得

$$\partial_{t'} \left[i(\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) + \nabla \cdot \left\{ 2(\nabla \phi^* \times \nabla \phi + \nabla \phi \times \nabla \phi^* + L') \right\} \right] = 0$$

从此式可以得出以下动量守恒定律：

$$\bar{P} = i \int (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) dx = \text{constant}$$

此时微观粒子的质心是被定义为

$$\langle x' \rangle = \frac{1}{N} \int x' |\phi|^2 dx$$

则有

$$\begin{aligned} N \frac{d\langle x' \rangle}{dt} &= \int x' \partial_{t'} |\phi|^2 dx' = - \int x' \nabla \cdot [i(\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi)] dx' \\ &= \int i(\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) dx = \bar{P} = -\bar{J} = - \int \bar{j} dx \end{aligned} \quad (4.16)$$

此式类似于在经典理论中动量的定义。由式(4.16)可知由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子具有经典粒子的特性。

(4) 在空间转动下的不变性和角动量守恒定律

如果在系统围绕对称轴 \vec{I} 做一个无穷小 $\delta\theta$ 的转动时，其作用量是不变的（这时 $\delta t' = \delta\phi = \delta\phi^* = 0$ 和 $\delta \vec{x}' = \delta\theta \vec{I} \times \vec{x}'$ ），则可导致角动量 $\vec{M} = i \int \vec{x}' \times (\phi^* \nabla \phi - \phi \nabla \phi^*) dx$ 的守恒。

(5) Galilean 不变性

如果在 Galilean 变换

$$x' \rightarrow x'' = x' - vt', \quad t' \rightarrow t'' = t, \quad \phi(x', t') \rightarrow \phi''(x'', t'') = \exp \left\{ -i \left[\frac{1}{2} v x' + \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} t' \right] \right\} \phi(x', t')$$

下，其作用量式(4.9)是不变的，则非线性 Schrödinger 方程式(3.2) [在 $A(\phi) = 0$ 时]能保持不变。对于一个无穷小速度 v ，则有 $\delta \vec{x}' = -v t'$ ， $\delta t' = 0$ 和 $\delta \hat{\phi} = \phi''(x'', t'') - \phi(x', t') = -(i/2) v x' \phi(x', t')$ 。在这种情况下，对式(4.13)过空间变量积分后可导致式(4.16)的动量守恒。这意味着微观粒子的质心速度是一个常数。

我们还可以得出其他守恒定律，由此可知，非线性量子力学有多个不同的不变性和守恒定律。这表明非原有量子力学空间和时间具有多种对称性。

4.2 微观粒子的位置及其运动规律

现在来研究在非线性量子力学中的微观粒子在外势场作用下在时间-空间中的位置变化和运动规律。

4.2.1 微观粒子的质心位置与速度

可以证明由式(3.2)所描述的微观粒子(孤子)是按经典规律运动的,即在外势场时或外势场为常数时,它做匀速运动。在与位置相关的外势场作用时,它做匀加速运动;在弹性力场作用时粒子具有振荡的性质,相当于经典谐振子的情况。现在来研究这一特性。

从一般的非线性式(3.2)出发,在 $A(\phi) = 0$ 时它的共轭式为

$$-i\hbar \frac{\partial \phi^*}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi^* + b|\phi|^2 \phi^* = V\phi^* \quad (4.17)$$

若设 $t' = t/\hbar$, $x' = x/\sqrt{\hbar^2/2m}$, 从式(3.156)~式(3.160)可知由这些方程描述的微观粒子是具有确定大小的,并局域在 $x = x_0$ 处。描述它的波矢或场量 $\phi(x', t')$ 是一个钟型的孤子,则具有 $\left. \frac{\partial \phi}{\partial x'} \right|_{x'=x'_0} = 0$, 即在 $x' = x'_0$ 时具有的振幅极大值;在 $t' = 0$, $x' = 0$,

$|x'| \rightarrow \infty$ 时,有 $\phi(x', t') \rightarrow 0$, 以及 $\frac{\partial}{\partial t'} \int \phi^* \phi dx' = 0$ 或 $\int \rho(x') dx' = \text{constant}$ 等特性。这意味着 $\phi^* \phi dx' = \rho(x') dx'$ 可以被认为在 x' 到 $x' + dx'$ 的间隔内粒子的有效质量。利用式(4.16),则在 $x'_0 + vt'$ 时微观粒子的质心则可以定义为

$$\langle x' \rangle = x'_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* x' \phi dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx' \quad (4.18)$$

从式(3.2)和式(4.17)可以得到

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt'} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} dx' = i \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi^* \frac{\partial^3 \phi}{\partial (x')^3} - \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial (x')^2} \right) dx' + \right. \\ \left. \int_{-\infty}^{+\infty} \left[b(\phi^*)^2 \phi \frac{\partial \phi}{\partial x'} + b\phi^* \phi^2 \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right] dx' - \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \frac{\partial V}{\partial x'} \phi dx' \right\} \end{aligned}$$

$$\text{式中,} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\phi^* \frac{\partial^3 \phi}{\partial (x')^3} - \frac{\partial \phi}{\partial x'} \frac{\partial^2 \phi^*}{\partial (x')^2} \right) dx' = 0$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[b(\phi^*)^2 \phi \frac{\partial \phi}{\partial x'} + b\phi^* \phi^2 \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} \right] dx' = -\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi^*)^2 \left(\frac{\partial}{\partial x'} b \right) \phi^2 dx' = 0$$

$$\text{于是有} \quad \frac{d}{dt'} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} dx' = i \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \frac{\partial V}{\partial x'} \phi dx' \quad (4.19)$$

则微观粒子的质心速度便可定义为

$$\begin{aligned}
 v_c &= \frac{d\langle x' \rangle}{dt'} = \frac{d}{dt'} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* x' \phi dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx' \right\} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi_i^* x' \phi + \phi^* x' \phi_i) dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx \\
 &= -2i \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi_{x'} dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx
 \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2.2 微观粒子按经典规律运动

于是，微观粒子的质心加速度便可定义为

$$\frac{d^2 \langle x' \rangle}{d(t')^2} = \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* x' \phi dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx' \right\} = -2i \frac{d}{dt} \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi_{x'} dx'}{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx'} \quad (4.21)$$

于是有

$$\frac{d^2 \langle x' \rangle}{d(t')^2} = -2 \frac{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \left(\frac{\partial V}{\partial x'} \right) \phi dx'}{\int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx'} = -2 \left\langle \frac{\partial V}{\partial x'} \right\rangle \quad (4.22)$$

式中， $V = V(x')$ 是作用于微观粒子的外势场。可在质心位置 $x'_0 = \langle x' \rangle$ 处展开 $\frac{\partial V(x')}{\partial x'}$ 为

$$\frac{\partial V(x')}{\partial x'} = \frac{\partial V(x'_0)}{\partial x'_0} + \sum_{i=1}^3 (x'_i - x'_0) \frac{\partial^2 V(x'_0)}{\partial x'^2_0} + \frac{1}{2!} \sum_{i,j=1}^3 (x'_i - x'_0)(x'_j - x'_0) \frac{\partial^3 V(x'_0)}{\partial x'_0 \partial x'_i \partial x'_j} + \dots$$

对上式两边取其期待值，可得

$$\left\langle \frac{\partial V(x')}{\partial x'} \right\rangle = \frac{\partial V(x'_0)}{\partial x'_0} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \Delta_{ij} \frac{\partial^3 V(x'_0)}{\partial x'_0 \partial x'_i \partial x'_j}$$

式中， $\Delta_{ij} = \langle (x'_i - x'_0)(x'_j - x'_0) \rangle = \langle (x'_i - \langle x'_i \rangle)(x'_j - \langle x'_j \rangle) \rangle$ 。从图 3.7 和式 (3.156) ~ 式 (3.160) 的非线性 Schrödinger 方程的孤子解可知，其质心位置是固定在 $\langle x' \rangle = x'_0$ 处的。在仅研究质心的运动特点时，我们仅涉及相关于质心 x'_0 的相关项，则可期待 $\Delta_{ij} = 0$ 。于是上式可写成

$$\left\langle \frac{\partial V(x')}{\partial x'} \right\rangle = \frac{\partial V(x'_0)}{\partial x'_0} \quad (4.23)$$

则微观粒子质心的加速度可写成

$$\frac{d^2 \langle x' \rangle}{d(t')^2} = -2 \frac{\partial V(x')}{\partial x'} = -2 \frac{\partial V(x'_0)}{\partial x'_0} \quad (4.24)$$

转化为原来的坐标系统中，则可得

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = - \frac{\partial V(\langle x \rangle)}{\partial \langle x \rangle} \quad (4.25)$$

4.2.3 运动方程的应用

式(4.25)与经典力学中宏观粒子的运动方程很相似。这就清楚地表明在非线性量子力学中的微观粒子可以满足经典运动规律式(4.25),从而充分体现了由非线性量子力学描述的微观粒子具有明显的粒子特性。显然,这是由于它具有确定的能量、动量和质量带来的结果。

实际上这个结果也可从微观粒子的能量、动量和质量表示式(4.2)~式(4.4)及式(3.2)以及在 $|x'| \rightarrow \infty$ 时 $\phi(x',t) \rightarrow 0$ 等特性中得出。这里不再推导。总之,在非线性量子力学中式(4.25)是正确的。

运用式(4.25),我们可求得由 $V(x)=0$ 的非线性Schrödinger方程式(3.155)描述的自由微观粒子解式(3.156)和在恒定外势场 $V(x')=\text{常数}$ 作用下的粒子解式(3.157)的运动特性。它们的质心加速度 $\frac{d^2\langle x \rangle}{dt^2}=0$,即它们做匀速运动。当 $V(x')=ax'$ 的外势场,其解为式(3.158),则微观粒子的质心加速度为

$$\frac{d^2\langle x' \rangle}{d(t')^2} = -2a = \text{constant} \quad (4.26)$$

即做匀加速运动。对处于外势场 $V(x')=a^2x'^2$ 的微观粒子,其解为式(3.160),这里 η 是孤子的振幅, ξ 是与微观粒子速度相关的常数, x'_0 是微观粒子的质心位置, t'_0 和 θ'_0 是常数。在这种情况下,微观粒子的质心加速度为

$$\frac{d^2\langle x' \rangle}{d(t')^2} = -4a^2x'_0 \quad (4.27)$$

因此,在这种条件下微观粒子做谐振运动,其所受到的“胡克力”与 $-4a^2x'_0$ 成正比。这些结果却与宏观粒子的运动规律很类似。

4.3 非线性量子力学中的微观粒子的拉格朗日方程和哈密顿方程

4.3.1 微观粒子的拉格朗日方程

在由非线性Schrödinger方程式(3.2)描述的非线性系统是一个可积系统,即该系统的特性可用哈密顿量和拉格朗日函数式(3.9)和式(3.10)来表征。此时微观粒子的状态波函数 ϕ 和 ϕ^* 是系统的动力学量,它们满足Poisson括号

$$\{\phi^{(a)}(x), \phi^{(b)}(y)\} = i\delta^{ab}\delta(x-y) \quad (4.28)$$

式中,

$$\{A, B\} = i \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\delta A}{\delta \phi} \frac{\delta B}{\delta \phi^*} - \frac{\delta B}{\delta \phi} \frac{\delta A}{\delta \phi^*} \right) \quad (4.29)$$

在 $A(\phi) = 0$ 时的式 (3.2) 所对应的拉格朗日密度函数式 (3.10) 中的独立变量 $\phi(x, t)$ 和 $\phi^*(x, t)$ 决定的系统的作用量在无穷小变化 $\delta\phi$ 和 $\delta\phi^*$ 下作用量的变化式 (4.12) 可写成

$$\delta S = \int_{t_b}^t \int_D \left[\frac{\partial L'}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial L'}{\partial \nabla \phi} \delta \nabla \phi + \frac{\partial L'}{\partial \phi_t} \delta \phi_t \right] dx dt + \text{c.c.} \quad (4.30)$$

式中, $\partial L' / \partial (\nabla \phi)$ 表示了一个具有分量为 $\partial L' / \partial (\partial_i \phi)$ ($i = 1, 2, 3$) 的矢量。进行部分积分后, 可得

$$\delta S = \int_{t_b}^t \int_D \left[\frac{\partial L'}{\partial \phi} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial L'}{\partial \nabla \phi} \right) - \partial_t \left(\frac{\partial L'}{\partial \phi_t} \right) \right] \delta \phi dx dt + \left[\frac{\partial L'}{\partial \phi_t} \delta \phi \right]_{t_0}^{t_1} + \text{c.c.} \quad (4.31)$$

由此式可得出, 对于一个具有确定值 $\phi(x, t_0)$ 和 $\phi(x, t_1)$ 的函数 $\phi(x, t)$, 要使作用量 S 取一个极值的充分和必要条件是它必须满足以下欧拉-拉格朗日方程:

$$\frac{\partial L'}{\partial \phi} = \nabla \cdot \left(\frac{\partial L'}{\partial \nabla \phi} \right) + \partial_t \left(\frac{\partial L'}{\partial \phi_t} \right) \quad (4.32)$$

从以上的证明可知, 如果一个系统的拉格朗日密度函数 $L' = L$ 已知, 便可由式 (4.32) 求出微观粒子满足的非线性 **Schrödinger** 方程式 (3.2)。这意味着在非线性量子力学中

式 (4.32) 的欧拉-拉格朗日方程和非线性 **Schrödinger** 式 (3.2) 有同等效果, 都是微观粒子的动力学方程。这是迥然不同于线性量子力学的一个新结果。如所知, 由于欧拉-拉格朗日方程是经典力学中描述宏观粒子的基本动力学方程。式 (4.32) 的存在清楚表明在非线性量子力学中微观粒子的经典特性。在线性量子力学中从系统的线性拉格朗日密度函数虽然也可写出线性的欧拉-拉格朗日方程, 并可得出线性 **Schrödinger** 方程, 但它只有波动解, 而无粒子性, 没有多大物理意义, 所以很少提起它。

4.3.2 微观粒子的哈密顿方程

显然, 相应于式 (3.2) 在 $A(\phi) = 0$ 时的哈密顿密度函数是用式 (3.9) 表示。现引入粒子的正则变量:

$$q_1 = \frac{1}{2}(\phi + \phi^*), \quad p_1 = \frac{\partial L'}{\partial (\partial_t q_1)}; \quad q_2 = \frac{1}{2i}(\phi - \phi^*), \quad p_2 = \frac{\partial L'}{\partial (\partial_t q_2)} \quad (4.33)$$

则系统的哈密顿密度函数式 (3.9) 变为

$$H = \sum_i p_i \partial_i q_i - L$$

于是, 相应的拉格朗日密度的变化为

$$\delta L' = \sum_i \frac{\delta L'}{\delta q_i} \delta q_i + \frac{\delta L'}{\delta(\nabla q_i)} \delta(\nabla q_i) + \frac{\delta L'}{\delta(\partial_i q_i)} \delta(\partial_i q_i) \quad (4.34)$$

式中, $L' = L$ 。而式(4.33)又定义了 p_i , 则系统的欧拉-拉格朗日方程式(4.32)变为

$$\frac{\partial L'}{\partial \phi} = \nabla \cdot \frac{\partial L'}{\partial \nabla \phi} + \partial_i p_i$$

而系统的哈密顿量的变化有

$$\delta H' = \sum_i \int (\partial_i q_i \delta p_i - \partial_i p_i \delta q_i) dx$$

于是应用变分原理可得到哈密顿方程为

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} = \frac{\delta H'}{\delta p_i}, \quad \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\delta H'}{\delta q_i} \quad (4.35)$$

由式(4.33)和式(4.34)很容易得到这组方程对应的复数形式为

$$i\partial_t \phi = \delta H / \delta \phi^* \quad (4.36)$$

这里 $H' = H$, 这与经典力学的哈密顿方程一致。由此看到, 从上述哈密顿方程式(4.36)

也可以推导出非线性 **Schrödinger** 方程。因此, 它和欧拉-拉格朗日方程一样, 能够用

来描述非线性量子力学中的微观粒子运动状态和特征。它和非线性 **Schrödinger** 方程

具有同一功能, 都是粒子的动力学方程。由于哈密顿方程是经典力学中粒子运动的基本方程, 则这一结果充分显示在非线量子力学中的微观粒子具有经典特性。

以上结果使我们认识到能用欧拉-拉格朗日方程和哈密顿方程来研究非线性量子力学系统微观粒子的运动特性。但这些方程是用粒子的状态变量 $\phi(x, t)$ 和 $\phi^*(x, t)$ 给出的。如果在能量-动量空间中, 根据 **de Broglie** 关系 $E = \hbar\omega = \hbar\omega$ 和 $\vec{P} = \hbar\vec{k}$, 则系统哈密顿量可用能量 E 或 ω 来代替, 其动力学变量用动量或波矢 k 和坐标 x 表示。则哈密顿量或能量是 k 和 x 的函数。在自然单位制下, 有

$$\left. \frac{d\omega}{dt'} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{x'} \frac{dk}{dt} + \left. \frac{\partial \omega}{\partial x'} \right|_k \frac{\partial x'}{\partial t'} = 0$$

的关系; 而在非线性量子力学系统中, 由上式可推出系统的哈密顿方程:

$$\left. \frac{dk}{dt'} = -\frac{\partial \omega}{\partial x'} \right|_k, \quad \left. \frac{dx'}{dt'} = \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{x'} \quad (4.37)$$

式中, $k = \partial\theta/\partial x'$ 是与时间相关的微观粒子的波矢; 而 $\omega = -\partial\theta/\partial t'$ 是它的频率, θ 是微观粒子波函数的相位值。应用这个哈密顿方程, 也可求出微观粒子的运动规律。

例如对于 $V(x') = \alpha x'$, 其相应的非线性 Schrödinger 方程的解由式 (3.157) 给出, 它的相位值为

$$\theta = 2(\xi - \alpha t')x' + \frac{4\alpha^2 t'^3}{3} - 4\alpha\xi t'^2 + 4(\xi^2 - \eta^2)t' + \theta_0$$

对于 $V(x') = \alpha x'^2$ 时的解表示在式 (3.159) 中, 相应的相位为

$$\theta = 2\xi x' \cos \left[2a(t' - t'_0) + \left(\frac{\xi^2}{a} \right) \sin 4a(t' - t'_0) \right] 4\eta^2(t' - t'_0) + \theta'_0$$

应用式 (4.37), 能求出在 $V(x') = \alpha x'$ 时的下列参数:

$$k = 2(\xi - \alpha t')$$

$$\omega = 2\alpha x' - 4(\xi - \alpha t')^2 + (2\eta)^2 = 2\alpha x' - k^2 + (2\eta)^2$$

于是这个微观粒子的质心群速度为

$$v_g = \frac{d\langle x' \rangle}{dt'} = \frac{\partial\omega}{\partial k} \Big|_{x'} = 4(\xi - \alpha t')$$

$$\text{相应的加速度是} \quad \frac{d^2\langle x' \rangle}{dt'^2} = \frac{dk}{dt'} = -2\alpha = \text{constant} \quad (x'_0 = \langle x' \rangle) \quad (4.38)$$

对于 $V(x') = \alpha^2 x'^2$ 的情况, 则有

$$k = 2\xi \cos 2\alpha(t' - t'_0)$$

$$\omega = 4\alpha\xi x' \sin 2\alpha(t' - t'_0) - 4\xi^2 \cos 4\alpha(t' - t'_0) - 4\eta^2$$

$$= 2\alpha x' (4\xi^2 - k^2)^{1/2} - 2k^2 + 4(\xi^2 - \eta^2)$$

于是微观粒子的质心群速度为

$$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} \Big|_{x'} = \frac{\alpha x'}{\xi} \frac{k}{\sqrt{1 - k^2/4\xi^2}} - 2k = 2\alpha x' \cot[2\alpha(t' - t'_0)] - 4\xi \cos[2\alpha(t' - t'_0)]$$

相应的加速度则为

$$\frac{dk}{dt'} = -\frac{\partial\omega}{\partial x'} \Big|_k = -2\alpha\sqrt{4\xi^2 - k^2} = -4\xi\alpha \sin[2\alpha(t' - t'_0)]$$

因为 $\frac{d^2\langle x' \rangle}{dt'^2} = \frac{dk}{dt'}$, 这里 $\langle x' \rangle = x'_0$, 则有

$$\frac{dk}{dt'} = \frac{d^2 \langle x' \rangle}{dt'^2} = -4\xi\alpha \sin[2\alpha(t' - t'_0)]$$

$$\text{和} \quad \langle x' \rangle = \frac{\xi}{\alpha} \sin[2\alpha(t' - t'_0)] \quad (4.39)$$

最后求得在此种情况下, 微观粒子的加速度为

$$\frac{d^2 \langle x' \rangle}{dt'^2} = \frac{dk}{dt'} = -4\alpha^2 \langle x' \rangle \quad (4.40)$$

从式(4.38)~式(4.40)中求出微观粒子的加速度与前面用 $\frac{\alpha^2 \langle x' \rangle}{dt'^2} = -2 \frac{\partial V}{\partial \langle x' \rangle}$ 求得的结果完全一致, 给出了相同的动力学特性, 即当 $V(x') = ax'$ 时微观粒子在力场中做匀速运动, 相当于点电荷粒子在均匀电场中的运动。当 $V(x') = \alpha^2 x'^2$ 时微观粒子以加速度, 在“胡克力”的作用下, 绕着平衡位置做谐振运动, 其振动的频率为 2α , 其振幅为 ξ/α , 其相应的振动方程为 $x' = x'_0 \sin \omega t'$, 而 $\omega = 2\alpha$ 和 $x'_0 = \xi/\alpha$ 。这些运动特点和规律完全与经典力学中粒子的运动规律一致。因此, 在非线性量子力学中得出这些规律和经典力学之间的相对对应性。这不但表明所建立的非线性量子力学是正确的, 同时也表明在非线性量子力学中的微观粒子具有经典粒子的特性。

4.4 在非线性系统中微观粒子的稳定性

如我们所知, 在非线性 Schrödinger 方程中, 由于存在动能项, 则粒子始终以波动形式色散于介质之中。因此微观粒子在线性量子力学中总是不稳定的。在非线性量子力学中刚好相反, 由于微观粒子具有粒子性, 即使受外场作用也是稳定的。

4.4.1 在受力场中的粒子的稳定性论证方法

众所周知, 粒子的稳定性是其粒子特性的重要标志。在非线性量子力学中, 微观粒子的稳定性可用很多方法加以证明。例如在 3.10 节中用式(3.161)证明了在 $A(\phi) = 0$ 时的式(3.2)描述的微观粒子是处于能量比线性 Schrödinger 方程式(1.1)描述的微观粒子更低的状态中, 因此它是稳定的。还可以借助于在 3.5 节的微扰论的直接和结构微扰法来证明微观粒子在受一个扰动作用时仍能保持其孤子特性来证明它的稳定性。但是在有外势场作用的情况下, 由非线性量子力学描述的微观粒子的稳定性又如何呢? 这值得研究。显然不能用与以上相同的战略来证明它的稳定性, 这是由于外势场干扰了粒子的运动状况, 使它们处于不同的状态之中。由于在一个有限范围内运动的不同类型微观粒子之间存在较强的相互作用, 便难以确定每个粒子的

行为。但是，如果一个粒子在这种情况下是处于能量极小值的状态中，根据物理学的能量极小值原理，则我们就能说它是稳定的，因为此时要改变它的状态必须增加能量。从这一思想出发，我们这儿将用极值原理来论证有相互作用的或处在外势场中的微观粒子的稳定性问题。

由非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的微观粒子的波矢 $\phi(x, t)$ 可被认为是粒子的场量，它具有所有阶导数值，而其积分也是收敛的和有限的。并具有在 $x' \rightarrow \pm\infty$ 时迅速趋近于零的特性，即

$$\lim_{|x'| \rightarrow \infty} \phi(x', t') = \lim_{|x'| \rightarrow \infty} \frac{\partial \phi}{\partial x'} = 0 \quad \text{及} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx' = \text{constant (或是 } t' \text{ 的函数)} \quad (4.41)$$

于是，有

$$\lim_{|x'| \rightarrow \infty} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial x'} = \lim_{|x'| \rightarrow \infty} \frac{\partial \phi^*}{\partial x'} x' \phi = 0 \quad (4.42)$$

则其微观粒子的质心位置则由式 (4.18) 定义，其质心速度用式 (4.20) 表示。

对于在 $A(\phi) = 0$ 的式 (3.2) 来讲，若用它的一个确定的孤子解与所有其他解来比较其能量的大小是无意义和不合理的，这是由于 $\int \phi^* \phi dx'$ ， $\langle x' \rangle$ 和 $d\langle x' \rangle / dt'$ 等的值是不相同的。比较合理的是选取在某一条件下处于其同等条件下所有的解来比较它们的能量大小才是有意义的。显然，在同一时刻 t_0 ，其 $\int \phi^* \phi dx'$ 取同一值 k ， $\langle x' \rangle$ 有同一值 x'_0 ， $d\langle x' \rangle / dt'$ 有同一值 u_0 的同一非线性 Schrödinger 方程的孤子解可能有无限多个。对于这些孤子解，若能确定它们之中的某一个的能量是最低的，则我们就能判定它是稳定的。这意味着我们必须借助于变分法，从其中选取出能量极小的解作为最稳定解，这样就能确定由它表示的微观粒子是稳定的。至此，这里我们用变分方法来求其稳定解。

4.4.2 稳定性的变分法证明

一般来讲，满足非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 的不同解，在一个确定时刻，应满足下列边界条件：

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi^* \phi dx' = K \\ \langle x' \rangle \Big|_{t'=t'_0} = u(t'_0) \\ \frac{d\langle x' \rangle}{dt'} \Big|_{t'=t'_0} = \dot{u}(t'_0) \end{cases} \quad (4.43)$$

现将式 (3.2) 在 $A(\phi) = 0$ 时的解设为

$$\phi(x', t') = \varphi(x' - u(t')) e^{\theta(x', t')} \quad (4.44)$$

并将其代入式(3.2), 在 $A(\phi) = 0$ 时可得到能量为

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right)^2 + \varphi^2 \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right)^2 - \frac{b}{2} \varphi^4 + \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x'} \right)^2 + V(x') \varphi^2 \right] dx' \quad (4.45)$$

则式(4.43)也变成

$$\begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^2 dx' = K, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} x' \varphi^2 dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^2 dx' = u(t') \\ 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^2 \frac{\partial \theta}{\partial x'} dx' / \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^2 dx' = \dot{u}(t') \end{cases} \quad (4.46)$$

在这一边界条件下, 采用拉格朗日不定乘子法可求出上述能量的极值, 不难得出下面的欧拉方程:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} = \left\{ V(x') + c_1(t'_0) c_2(t'_0) [x' - u(t'_0)] + c_3(t'_0) \left[2 \frac{\partial \theta}{\partial t'} - \dot{u}(t'_0) \right] + \left(\frac{\partial \theta}{\partial x'} \right)^2 \right\} \varphi - b \varphi^3 = 0 \quad (4.47)$$

$$\frac{\partial^2 \theta}{\partial x'^2} \varphi^2 + 2 \frac{\partial \theta}{\partial x'} \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x'} + 2 c_3(t'_0) \varphi \frac{\partial \varphi}{\partial x'} = 0 \quad (4.48)$$

这里拉格朗日因子 c_1 , c_2 和 c_3 是 t' 的函数。现令

$$c_3(t'_0) = -\dot{u}(t'_0)/2$$

由式(4.48)不难发现在

$$\partial \theta / \partial t' - \dot{u} / 2 \neq 0 \quad (4.49)$$

时可得

$$\frac{2}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x'} = \left(-\partial^2 \theta / \partial x'^2 \right) / \left[-\frac{\partial \theta}{\partial x'} - \frac{1}{2} \dot{u}(t') \right] \quad \text{或} \quad \varphi^2 = \frac{g(t'_0)}{\frac{\partial \theta}{\partial x'} - \frac{1}{2} \dot{u}(t')} \quad (4.50)$$

这里 $g(t'_0)$ 是一个积分常数, 则

$$\theta(x', t') = g(t'_0) \int_0^{x'} \frac{dx''}{\varphi^2} + \frac{\dot{u}(t'_0)}{2} \varphi' + M(t'_0) \quad (4.51)$$

M 是另一个积分常数。设 $c_2(t'_0) = \frac{1}{2} \ddot{u}(t'_0)$, 则可得

$$\left. \frac{\partial \theta}{\partial x'} \right|_{t=t'_0} = \frac{g(t'_0)}{\varphi^2} + \frac{u(t'_0)}{2}$$

得

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} = \left\{ V(x') + \frac{\ddot{u}(t'_0)}{2} x' + \left[c_1(t'_0) - \frac{\ddot{u}(t'_0)}{2} u(t'_0) + \frac{u^2(t'_0)}{4} \right] \right\} \varphi - b \varphi^3 + \frac{g^2(t'_0)}{\varphi^3} \quad (4.52)$$

令

$$c_1(t'_0) = \frac{u(t'_0) \ddot{u}(t'_0)}{2} - \frac{\dot{u}^2(t'_0)}{2} + M(t'_0) + h \quad (4.53)$$

这里 h 是与 t'_0 无关的不确定常数, 并假设 $Z = x' - u(t'_0)$, 则 $\frac{\partial^2 \varphi}{\partial (x')^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial Z^2}$ 。这表明它仅是 Z 的函数, 为了使式 (4.52) 的右边仅是 Z 的函数, 则 φ , φ^3 和 $1/\varphi^3$ 的系数一定是 Z 的函数。于是, $g(t'_0) = g_0 = \text{constant}$ 。而 $V(x') + \frac{\ddot{u}(t'_0)}{2}x' + M(t'_0) - \frac{u^2(t'_0)}{4} = \tilde{V}_0(Z)$, 则式 (4.52) 变成

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} = [\tilde{V}_0(x' - u(t'_0)) + h] \varphi - b\varphi^3 + g^2(t'_0)/\varphi^3$$

在上述条件下, 则有 $\tilde{V}_0(x' - u(t'_0)) = 0$ 的关系, 于是上式变成

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial (x')^2} = h\varphi - b\varphi^3 + g^2(t'_0)/\varphi^3 \quad (4.54)$$

由于 φ 是式 (4.54) 在 $g(t'_0) = \text{constant}$ 和 $h = \text{constant}$ 时的解, 对于充分大的 $|Z|$, 则可以假设 $|\varphi| \leq \beta/|Z|^{1+\Delta}$, 这里 Δ 是一个小数。但在式 (4.54) 中, 仅能保持相应于 $g(t'_0) = 0$ 的 $\varphi(Z)$ 的解, 以保证在 $\lim |Z| \rightarrow \infty$ 时, 有 $d^2\varphi/dZ^2 = 0$ 的关系成立。于是我们最后可得到

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} = h\varphi - b\varphi^3$$

因此, 非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 的解式 (3.156) 是满足上式的。由此, 这就证明了在约束条件式 (4.51) 被满足的条件下, 相应于上式的解式 (3.156) 所对应的能量应取极小值。于是, 就证明了具有任意外势场作用的非线性 Schrödinger 方程的孤子解是稳定的, 则也证明了由这个解描述的微观粒子是一个真正稳定的物理粒子。

4.5 微观粒子在界面上的反射和传播特性

由以上研究看出, 虽然在非线性量子力学中的微观粒子具有粒子性, 但它一定不等同于宏观的“点”粒子, 因为除具有粒子特性外, 它还同时具有波动性。这种波动性已从式 (3.2) 在 $V(\vec{r}, t) = A(\phi) = 0$ 时解式 (3.156) 看出。其中的包络波被载波所携带而在空间中进行传播, 在本质上式 (3.156) 就是一个行波, 它具有确定的波速 (包括相速度和群速度)、振幅和频率, 如图 3.7 所示。同时它满足式 (3.22) 的非线性波动叠加原理。因此, 它具有一般波动的特点。另外, 它在遇到障碍物时也像宏观波动一样, 会产生反射和透射及衍射。这一节研究由式 (3.2) 描述的非线性 Schrödinger 方程的微观粒子在界面上产生的反射和透射特性。

如我们所知, 在非线量子力学中, 微观粒子在非均匀介质中的传播是不同于在均匀介质中的传播状况的。这种非均匀性也是由于物理的边缘结构或两种不同的非线性材料并置在一起形成的界面等因素产生的。可以预见当一个微观粒子传播到这种不均匀结构的界面时, 如果它具有波动性, 则将有一部分进入另一种介质, 同时也有一部分反射回原来的介质。Lonngren 等人在由正和负离子组成的等离子体界面上观察到了微观粒子形成的孤子的反射和透射现象。此时, 这个微观粒子正好由 $V(r, t) =$

$A(\phi) = 0$ 的式 (3.2), 即式 (3.155) 所描述。随后他们又用数值的方法模拟了在这种介质界面上的这类粒子(孤子)的反射和透射图像。其结果也与 Aceves 等人用非线性

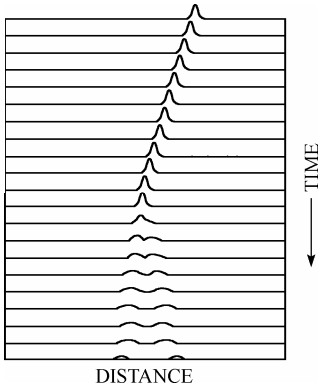


图 4.1 由式 (3.155) 描述的微观粒子入射在界面时产生的反射和透射效应的数值模拟结果

Schrödinger 方程在 $V(\vec{r}, t) = A(\phi) = 0$ 的同一条件下模拟的结果相似。Lonngren 等人得到的, 在等间隔的时间点上的一系列信号图像示于图 4.1 中。从这幅图中可看到所得到的信号具有孤子的特点, 即在传播中始终保持振幅不变。同时也看到从顶部入射的微观粒子在向前传播的过程中, 在遇到两种介质的界面时一部分信号反射, 而另一部分透射到另一介质中。其中峰的非线性折射系数的变化是入射微

观粒子的线性折射系数的 0.67%, 而在两个区域之间的线性不均匀性也刚好是 0.67%。Lonngren 等人假设入射的微观粒子(孤子)的能量是没有辐射损失的, 其全部转移给了反射和透射的孤立波中。从产生这个图像所使用的数值, 如入射粒子的相对振幅, 可推导出产生的反射和透射孤立波的特性, 它的能量有

$$E_{\text{inc}} = E_{\text{ref}} + E_{\text{trans}} \quad (4.55)$$

Lonngren 等人将它们的能量用孤子的宽度 W_j 和它的振幅 A_j 来表示, 即为

$$E_j = \frac{A_j^2}{Z_c} W_j$$

这里的下标 j 表示了微观粒子的入射、反射和透射部分; Z_c 是材料的特性阻抗。于是上式可写成

$$\frac{A_{\text{inc}}^2}{Z_{\text{cl}}} W_{\text{inc}} = \frac{A_{\text{ref}}^2}{Z_{\text{cl}}} W_{\text{ref}} + \frac{A_{\text{trans}}^2}{Z_{\text{clI}}} W_{\text{trans}} \quad (4.56)$$

对于 $V(r, t) = A(\phi) = 0$ 的式 (3.2) 的孤子解式 (3.156) 具有 $A_j W_j = \text{constant}$ 的特点, 这里 A_j 代替了式 (3.156) 中的 A_0 。现定义反射系数为 $R = A_{\text{ref}}/A_{\text{inc}}$, 而透射系数为 $T = A_{\text{trans}}/A_{\text{inc}}$, 则有

$$1 = R + \frac{Z_{\text{cl}}}{Z_{\text{clI}}} T \quad (4.57)$$

为证明上述结果的正确性, Lonngren 等人用 KdV 方程来做同样的实验。他们发现所检查到的由此方程给出的信号具有 KdV 孤子的特点。在图 4.2 示出了 Lonngen 等人用一个小探针在相等间隔的时间点上所测得的由 KdV 方程给出的一系列图像。这些图像示出了由一个微扰偏置物体在均匀等离子体表面上所产生的。从这幅图看到探针首先检测到入射孤立波的信号, 在过了一段时间后才又检测到反射和透射孤立波信号。当探针通过反射点时, 实验观察到入射和反射孤立波结合在一起, 在超过这点后, 这两个波的强度减小, 但仍保持一个稳定的状态。其后, 又观察到透射孤立波, 它也是一个稳定的状态, 如图 4.2 所示。这些入射波、反射波和透射波的相对振幅也容易推导出来。对于 KdV 孤子, 它们有 $A_j W_j^2 = \text{constant}$ 。于是它们的反射和透射系数有如下关系:

$$1 = R^{3/2} + \frac{Z_{\text{cl}}}{Z_{\text{clI}}} T^{3/2}$$

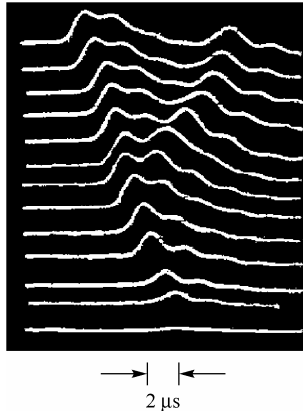


图 4.2 在反射器前面用探针检测到 KdV 孤立波的一系列信号的运动图像。图像从 6 mm 到 30 mm 的范围内以 2 mm 的间隔逐渐增加, 在反射点时其入射和反射孤立波结合在一起。这个反射点在反射器前面大约 16 mm 处, 其透射孤立波也在此实验中观察到。在 8~6 mm 时的振幅大小比原来的轨迹增加了大约 2 倍

对于由式(3.155)描述的微观粒子(NLS soliton)和 KdV 孤子(KdV soliton)在一个确定的特征阻抗值时所得到的上述反射系数与透射系数的关系一起示于图4.3中。从图4.3中可以看到,其解析结果与实验和数值模拟的结果基本一致。所存在的与解析解的振荡偏离是由于在孤立波传播过程中出现的辐射现象引起的。在渐近极限下,这个辐射效应耗散了入射孤子的能量,从而使它们的反射系数和透射系数与解析结果有所下降。

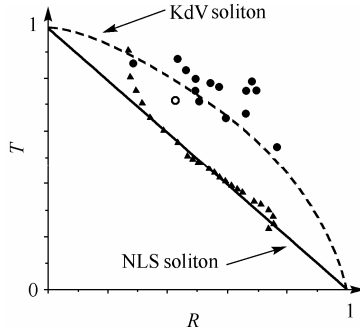


图 4.3 微观粒子(孤子)和 KdV 孤子的反射系数与透射系数之间的关系。其中,实三角形表示由 Lonngren 等人对由式(3.155)得到的数值结果。而实圆圈和空圆圈分别表示了对 KdV 孤子由 Lonngren 等人得到的实验结果和 Y.Nishida 得到的解析结果

由以上结果可知,在非线性量子力学中微观粒子的上述传播特征不但不同于 KdV 孤立波,同时也不同于在线性量子力学中由线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子和经典波动的特征。Lonngren 等人求出了线性波动的反射波和透射波的关系为

$$1 = R^2 + \frac{Z_{cl}}{Z_{cll}} T^2 \quad (4.58)$$

此时入射波、反射波和透射线性波的宽度 W_j 都一样。于是它们的反射系数和透射系数分别为

$$R = \frac{Z_{cll} - Z_{cl}}{Z_{cll} + Z_{cl}}, \quad T = \frac{2Z_{cll}}{Z_{cll} + Z_{cl}}$$

因此,线性波动的反射和透射特性既不同于 KdV 孤立波,也不同于非线性量子力学中微观粒子的反射和透射特点,而主要表现在所具有的特征上。由此,可得出在非线性量子力学中的微观粒子具有波动性,但这种特点既不同于线性波和经典波动,也不同于 KdV 孤立波。

4.6 非线性微观粒子的 Fraunhofer 衍射效应

众所周知,所有的波动都具有衍射的特征。在线性量子力学中由于微观粒子具有波动性,则在其动能小于势能的高度时也能隧道过势垒而传输,这是一种波动的

衍射效应。在非线性量子力学中的微观粒子由于具有波动性，也有这种衍射的效应。现在使用 Konotop 的方法来讨论由式(3.2)的非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子通过网栅屏产生的 Fraunhofer 衍射效应。此时，假设微观粒子具有小尺度的初始相位调制和大的初始强度。为此，从第3章介绍的 Lax 表示和反散射方法出发来研究这个衍射效应。在此方法中，相应于非线性 Schrödinger 方程式(3.155)的两个波函数满足

Zakharov-Shabat 方程式(3.28)或式(3.84)，这里 λ 是本征值谱参数，选 $\phi_0(x') = \phi(x', t' = 0)$ 为式(3.155)的初始条件，Konotop 将它表示为

$$\phi_0(x') = b'g(x')f(x') \quad (4.59)$$

这里 $g(x')$ 是随机和统计齐次函数，具有以下特性：

$$\langle g(x') \rangle = g, \quad \langle g(x')g^*(x'_1) \rangle = Q_{d_1}(x' - x'_1), \quad \langle g(x')g(x'_1) \rangle = Q_{d_2}(x' - x'_1) \quad (4.60)$$

式中， $\langle \cdot \rangle$ 表示对随机函数 $g(x')$ 的所有可实现过程求平均； d_1 和 d_2 是修正半径(以下假设 $d_1 = d_2 = d$)； $f(x')$ 是变化幅度为一个单位的正规函数，即 $|f(x')| \sim |g(x')| \sim 1$ ， b' 表示初始脉冲的振幅，并且是一个非线性参数。

现在，将 Zakharov-Shabat 方程式(3.84)的解表示为

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = C(x')\psi_1(x', t') + D(x')\psi_2(x', t') \quad (4.61)$$

$$\text{式中,} \quad \psi_1(x', \lambda) = \begin{pmatrix} e^{i\lambda_1 x'} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2(x', \lambda) = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{-i\lambda_2 x'} \end{pmatrix} \quad (4.62)$$

此处的 $C(x')$ 和 $D(x')$ 满足初始条件： $C(x' = -\infty) = C_0$ ， $D(x' = -\infty) = 0$ 。则反射系数 $R(\lambda)$ 可表示为

$$R(\lambda) = \lim_{x' \rightarrow \infty} r(x')e^{-i2\lambda x'}, \quad r(x') = \frac{D(x')}{C(x')}e^{i2\lambda x'} \quad (4.63)$$

从式(4.62)可知， $r(x')$ 满足 Riccati 微分方程：

$$\frac{dr}{dx'} = 2i\lambda r + i\phi_0^*(x')b' - i\phi_0(x')r^2 \quad (4.64)$$

Konotop 将“势函数” $\phi_0(x')$ 限制在 $(0, L)$ 区间，而在 $x' < 0$ 和 $x' > L$ 的条件时是 $\phi_0(x') = 0$ 。在这种情况下，对于式(4.64)的初始条件为 $r(0) = 0$ 和 $r' = (x' = \infty) = r(L)$ 。于是，式(4.64)可重新写为

$$\frac{dr}{d\xi'} = i\varepsilon \left[Ar + f^*(d\xi')g'^*(\xi') - f(d\xi')g'(\xi')r^2 \right] \quad (4.65)$$

这里 $A = \lambda/b'$, $\varepsilon = db'$, $g(\xi') = g(x')$, $\xi' = x'/d$ 。

对于 $d \propto k^{-1}$ ($\varepsilon \propto 1$) 的小相关情况, $r(\xi')$ 可表示为一个级数:

$$r(\xi') = r^{(0)}(\xi', \xi_1, \dots) + \varepsilon r^{(1)}(\xi', \xi_1, \dots) + \dots \quad (4.66)$$

$$\text{这里 } \xi_i = \varepsilon^i \xi', \text{ 并相应地有 } \frac{d}{d\xi'} = \frac{\partial}{\partial \xi'} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial \xi_1} + \dots \quad (4.67)$$

在 $f(d\xi') = f(x_1)$ (即 $b' = 1$ 和 $\varepsilon = d$) 的情况下, 从式(4.65)~式(4.67)可以得到

$$\frac{\partial r^{(0)}}{\partial \xi'} = 0 \quad (4.68)$$

$$\text{和 } \frac{\partial r^{(1)}}{\partial \xi'} = -\frac{\partial r^{(0)}}{\partial \xi_1} + iAr^{(0)} + if^*(\xi_1)g'^*(\xi') - if(\xi_1)g'(\xi')[r^{(0)}]^2 \quad (4.69)$$

这里, ξ' 和 ξ_i ($i=1, 2, \dots$) 是一些独立变量。由式(4.68)可得, $r^{(0)} \equiv r^{(0)}(\xi_1)$ 。于是, 从式(4.69)可求得 $r^{(1)}$ 为

$$r^{(1)} = -\xi' \frac{\partial r^{(0)}}{\partial \xi_1} + iA\xi' r^{(0)} + i\xi' f^*(\xi_1)F^*(\xi') - i\xi' f(\xi_1)F(\xi')[r^{(0)}]^2 \quad (4.70)$$

此处的 $F(\xi')$ 表示了由 Konotop 引入的一个平均值:

$$F(\xi') = \frac{1}{\xi'} \int_0^{\xi'} g(x') dx'$$

如果要求式(4.70)右边的久期项趋于零, 则我们可以得出 $r^{(0)}(\xi_1)$ 应满足方程

$$\frac{\partial r^{(0)}(\xi_1)}{\partial \xi_1} = iAr^{(0)} + if^*(\xi_1)F^*(\tilde{L}) - if(\xi_1)F(\tilde{L})[r^{(0)}]^2 \quad (4.71)$$

式中, $\tilde{L} = L/\varepsilon$ 。在此时其平均反射系数可表示成 $r(L) = r^{(0)}(L) + O(\varepsilon^2)$ 。

$$\text{现让 } G(\xi_1, x') = if^*(\xi_1)F^*(x') - if(\xi_1)F(x')[r^{(0)}]^2$$

$$\text{其中有关系 } \begin{cases} \Re G(\xi', x') = G_1 \\ \Im G(\xi', x') = G_2 \end{cases} \quad \text{和} \quad \begin{cases} \Re r^{(1)} = r_1^{(1)} \\ \Im r^{(1)} = r_2^{(1)} \end{cases}$$

$$\text{于是式(4.70)可写为 } r_i^{(1)}(\xi') = \xi' [G_i(\xi_1, \xi') - G_i(\xi_1, L)]$$

但在随机初始条件下, 即 $g(x')$ 是一个随机函数时, 反射系数 $r_i^{(1)}(\xi')$ 也是一个随机函数, 并有

$$\varepsilon \left| \left\langle r_i^{(1)}(\xi', \xi_1) \right\rangle \right| \ll 1 \quad (4.72)$$

$$\text{和 } \varepsilon \sqrt{W[r_i^{(1)}(\xi', \xi_1)]} \ll 1 \quad (4.73)$$

关系存在, 其中 $W_{[r]} = \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2$ 是色散的, 可表示为

$$W[r_i^{(1)}(\xi')] = W[\xi' G_i(\xi_1, \xi')] + \frac{\xi'}{\tilde{L}} W[\tilde{L} G_i(\xi_1, L)] - \frac{2\xi'}{\tilde{L}} \left[\langle \xi' G_i(\xi_1, \xi') \tilde{L} G_i(\xi_1, L) \rangle - \langle \xi' G_i(\xi_1, \xi') \rangle \langle \tilde{L} G_i(\xi_1, L) \rangle \right] \quad (4.74)$$

由于此处的讨论仅限于具有有限色散 $|Q(x')| \approx |W(x')| \approx 1$ 下的统计齐次函数 $g(x')$ ，则式(4.74)可粗略估计为 $W[r] = \tilde{L}$ ，于是不等式(4.72)和式(4.73)可重新写为 $L \square \varepsilon^{-1}$ 。如果进一步假设 $g(x')$ 表示了一个各态历过程，则函数 $F(L)$ 可约化为具有不确定性 εL^{-1} 的 $\langle g(L) \rangle + O(\varepsilon L^{-1})$ 和 $\langle r^{(1)}(L) \rangle = 0$ 。于是在 $\varepsilon \square L \square \varepsilon^{-1}$ 的间隔内，Konotop 求得

$$\frac{\partial r^{(0)}}{\partial \xi_1} = i A r^{(0)} + i f^*(\xi_1) g^* - i f(\xi_1) g(x') [r^{(0)}]^2 \quad (4.75)$$

利用以上关系，Konotop 研究了在一个间隔内具有相位调剂的非相干动波特征的微观粒子(孤子)的 Fraunhofer 衍射特性。在网栅屏上检测到的衍射图像会受到网栅屏之后的介质的非线性的影响。在这个衍射中非线性 Schrödinger 方程的初始条件可取为具有以下随机相位的势函数

$$\phi_0(x') = \begin{cases} \phi_0 e^{\theta(x') + i\theta_0} & \text{对于 } 0 \leq x' \leq L \\ 0 & \text{对于 } x' < 0 \text{ 或 } x' > L \end{cases}$$

这里 $\theta(x')$ 是一个具有统计特征: $\langle \theta(x) \rangle = 0$, $\langle \theta(x)\theta(x') \rangle = Q(x' - x_1)$, 则 $Q(0) = \sigma^2$ 高斯噪声在 $0 < x' < L$ 范围内可求得

$$\langle \phi_0(x') \rangle = \phi_0 e^{-\sigma^2/2} \quad \text{和} \quad \langle \phi_0(x') \phi_0(x'_1) \rangle \approx Q(x' - x'_1) \quad (4.76)$$

如果在 $x' \rightarrow \infty$ 时, $Q(x') \rightarrow 0$, 则 $\phi_0(x')$ 表示一各态历经。于是, 能用式(4.75)将反射系数表示为

$$r(L) = - \frac{(-i)^{(\delta+1)/2} \phi_0 \tanh \left[i^{(\delta+1)/2} L A_\delta \right] e^{-i\theta_0 - 2i\lambda L}}{(-i)^{(\delta+1)/2} \lambda \tanh \left[i^{(\delta+1)/2} L A_\delta \right] + i A_\delta} \quad (4.77)$$

$$\text{式中,} \quad A_\delta = \sqrt{\phi_0^2 e^{-\delta^2} + \delta \lambda^2} \quad \delta = \pm 1 \quad (4.78)$$

现在确定这类 Fraunhofer 衍射的特点。显然, 上式中的 $\delta = 1$ 和 $\delta = -1$ 分别相应于聚焦和散焦介质。则在衍射区域出现的衍射的图像主要由 Manakov 式

$$|\phi(x', t')|^2 = \frac{1}{4\pi t'} \ln \left| 1 + \delta |r(L)|^2 \right|^\delta \quad (4.79)$$

来决定。从式(4.76)、式(4.78)和式(4.79)可以确定在这个条件下的微观粒子由于相位调制所产生的衍射图像的特性, 因而很类似于具有小振幅的正常波的衍射。就其相位调制而言, 此时不存在相位涨落色散, 即对任意 $Q(x' - x'_1)$, 不存在 $\langle e^{i[\theta(x') + \theta(x_1)]} \rangle \leq 1$ 的

限制。

类似的结果也能从形为

$$\phi_0(x') = \begin{cases} \phi_0 e^{\theta(x')} & \text{对于 } 0 \leq x' \leq L \\ 0 & \text{对于 } x' < 0 \text{ 或 } x' > L \end{cases}$$

的振幅调制的波动中得到，其解是将式(4.76)中的 σ^2 用 $-\sigma^2$ 代替后得到。但是对于聚焦介质，必须考虑微观粒子新状态产生的可能性。这导致了在 $\delta=1$ 的式(4.79)中的 σ^2 值有一个上限值。

在式(4.79)中的 $r^{(0)}$ 不明显依赖于 L ，于是可将上述结果推广到具有极高减少速率的无穷初始条件情况。在这种情况下，在初始值 $\phi_0(x')$ 不为零的区间常用 L 来标志。

从以上的讨论可知，由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子若在具有随机初始条件和一个相关半径的微扰系统中运动时会发生 Fraunhofer 衍射。对于具有缓慢变化的初始相位调制(包括在振幅和相位调制的脉冲波在一个色散介质中传播)也会出现这种衍射现象。这种现象的发生表明了非线性微观粒子具有一个波动性。

另外，Zakharov 和 Shabat 等人也研究了具有初始调制为

$$\phi|_{t'=0} = \begin{cases} 0 & |x'| < a' \\ 1 & |x'| > a' \end{cases} \quad (4.80)$$

的散焦介质中的微观粒子的 Fraunhofer 衍射。这里 a' 表示了衍射栅带的半宽度，此时粒子的振幅为1。在这种情况下，需要求解 $q = \phi|_{t'=0}$ 的 Zakharov-Shabat 方程，其解为

$$\psi = \begin{cases} c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} e^{-i\lambda x'} + c_2 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} e^{i\lambda x'} & \text{对于 } |x'| < a' \\ c_2 \begin{bmatrix} i(1-\lambda^2)^{1/2} - \lambda \\ 1 \end{bmatrix} e^{-\sqrt{1-\lambda^2}x'} & \text{对于 } x' > a' \\ c_1 \begin{bmatrix} 1 \\ i(1-\lambda^2)^{1/2} - \lambda \end{bmatrix} e^{-\sqrt{1-\lambda^2}x'} & \text{对于 } x' < -a' \end{cases} \quad (4.81)$$

这里 c_1 和 c_2 为 Jost 系数。如果要求解式(4.81)在 $x' = \pm a$ 连续，在通过一些基本变换后便可得到以下结果：

$$\cos 2\lambda a' = \lambda \quad (4.82)$$

方程式(4.82)存在有一组对称的零点 $\pm\lambda_n$ ，它们的值为 $|\lambda_n| < 1$ ，并接近于0。对于充分小的 a' ，此时仅有一对零点。对于大的 a' 值，零点的对数 N 大约为 $N = 2a'/\pi$ 。其式(4.82)的零点对应于微观粒子。此时，粒子在 (x', t') 平面上直线传播。具有本征值为 λ_n 的微观粒子将沿相角为 $\theta_n = \arctan(2\lambda_n)$ 的方向传播，这样的传播带最少有两个。因此，微观粒子在非线性介质中通过一个带的衍射原则上是不同于线性波通过带的衍射。事实上，如第2章所述，在超导中超导电子的 Fraunhofer 衍射早已被观察到。由此可确认微观粒子在非线性介质中的 Fraunhofer 衍射是客观存在的。它显示了在非线性介质中微观粒子具有的波动性。

4.7 在非线量子力学中的测不准关系

4.7.1 在线性量子力学中的测不准关系

众所周知,在线性量子力学中最使人困惑的一个问题是对测不准关系的理解。所谓测不准就是在一对共轭量,如能量和时间、坐标和动量、角动量和角度之间,始终存在一个不确定性,即一个量的不确定量越小,则它的共轭量的变化就越大。其乘积始终大于一个量子单位的一半,即 $\hbar/2$, 这里 \hbar 为普朗克常数。这意味着这两个量总是不可能同时确定。这是线性量子力学中的一个基本关系,体现了微观粒子的基本特性,并与测量过程无关。只要量子力学得以使用,则测不准关系一定存在。这可从它的导出过程清楚看出。

在线性量子力学中,此关系式一般从

$$I(\xi') = \int |(\xi' \Delta \hat{A} + i \Delta \hat{B}) \psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} \geq 0 \quad (4.83)$$

$$\text{或} \quad \bar{\hat{F}}(\xi) = \int \psi^*(\vec{r}, t) \hat{F} [\hat{A}(\vec{r}, t), \hat{B}(\vec{r}, t)] \psi(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (4.84)$$

关系式中导出。在坐标表象中, \hat{A} 和 \hat{B} 是两个物理量对应的算符,例如, \hat{x} 和 \hat{p}_x , \hat{y} 与 \hat{p}_y 和 \hat{z} 与 \hat{p}_z , 它们满足对易关系: $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, $\psi(\vec{r}, t)$, $\psi^*(\vec{r}, t)$ 表示微观粒子状态的波函数,它们满足线性 Schrödinger 方程。设 $\hat{F} = (\Delta \hat{A} \xi' + \Delta \hat{B})^2$, $\Delta \hat{A} = \hat{A} - \bar{A}$, $\Delta \hat{B} = \hat{B} - \bar{B}$, 这里 \bar{A} 和 \bar{B} 是这些算符在状态 $\psi(\vec{r}, t)$ 中的平均值, ξ' 是一个参量。运用线性量子力学的基本假设,通过一定运算后可得

$$I = \bar{F} = \overline{\Delta \hat{A}^2 \xi'^2} + 2 \overline{\Delta \hat{A} \Delta \hat{B}} \xi' + \overline{\Delta \hat{B}^2} \geq 0$$

$$\text{或} \quad \overline{\Delta \hat{A}^2 \xi'^2} + \bar{\hat{C}} \xi' + \overline{\Delta \hat{B}^2} \geq 0 \quad (4.85)$$

再做简单的运算,可求得常见的测不准关系:

$$\overline{\Delta \hat{A}^2} \overline{\Delta \hat{B}^2} \geq \frac{\bar{\hat{C}}^2}{4} \quad (4.86)$$

在这个关系式的推导中,仅使用了线性量子力学的一些基本假设。如力学量用算符表示和微观粒子用波函数表示,力学量的平均值及算符的对易关系等基本假设,因此它与测量过程无关。由此可知,测不准关系是来自于量子力学本身,并且是量子力学的必然结果,从而体现了微观粒子的波动性。但是式(4.86)的表示是不够确切的。事实上,式(4.61)可写成

$$\hat{F} = \overline{\Delta \hat{A}^2} \left(\xi' + \frac{\overline{\Delta \hat{A} \Delta \hat{B}}}{\overline{\Delta \hat{A}^2}} \right)^2 + \overline{\Delta \hat{B}^2} - \frac{(\overline{\Delta \hat{A} \Delta \hat{B}})^2}{\overline{\Delta \hat{A}^2}} \geq 0$$

$$\text{或} \quad \overline{\Delta\hat{A}^2} \left(\xi' + \frac{\bar{\hat{C}}}{4\Delta\hat{A}^2} \right)^2 + \overline{\Delta\hat{B}^2} - \frac{(\bar{\hat{C}})^2}{4\Delta\hat{A}^2} \geq 0 \quad (4.87)$$

这表明, 当 $(\overline{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}})^2$ 或 $\bar{\hat{C}}^2/4$ 不等于零时, $\overline{\Delta\hat{A}^2} \neq 0$ 成立; 否则, 不能得到式(4.87)。于是不可能有关系 $\overline{\Delta\hat{A}^2\Delta\hat{B}^2} > (\overline{\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}})^2$ 存在。这是因为如果 $\overline{\Delta\hat{A}^2} = 0$, 则式(4.87)不成立。因此, $\overline{\Delta\hat{A}^2} \neq 0$ 是测不准关系存在的必要条件。但 $\overline{\Delta\hat{A}^2}$ 可以趋近于零, 但不能等于零。于是, 在量子力学中测不准关系的正确表示形式应为

$$\overline{\Delta\hat{A}^2\Delta\hat{B}^2} > \frac{(\bar{\hat{C}}^2)^2}{4} \quad (4.88)$$

由此可见, 在量子力学中由于微观粒子总是弥散于所在的空间, 所以共轭力学量之间永远不能同时确定。这就是测不准关系的正确表述形式。测量虽然能够扰动粒子的状态, 但它与测不准关系的存在无关。

4.7.2 在非线性量子力学中微观粒子的测不准关系

由前可知, 由于有非线性相互作用的存在, 在非线性量子力学中微观粒子是局域的。对于用 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 的式(3.2)描述的微观粒子的状态是用式(3.95)的孤子来表示的, 它是局域在 $x' = x'_0$ 处, 此孤子的动力学方程为式(3.155)。现取 $b = 1$, 这个解的傅里叶变换式可近似表示为

$$\phi_s(p, t') = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_s(x', t') e^{-ipx'} dx' \quad (4.89)$$

这里表示了 $\phi_s(p, t')$ 是局域在动量空间的 p 点处。对于局域在 $x' = x'_0$ 的式(3.95)的孤子的傅里叶表示可表示为

$$\phi_s(p, t') = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{sech} \left[\frac{\pi}{2\eta} (p - 2\sqrt{2}\xi) \right] e^{4i(\eta^2 + \xi^2 - p\xi/2\sqrt{2})t' - i(p - 2\sqrt{2}\xi)x'_0} \quad (4.90)$$

式(4.89)和式(4.90)表明若微观粒子在坐标空间是局域的, 则它在动量空间也是局域的, 即表象变换不会改变粒子局域的特性。为了方便, 这里引入归一化因子 A_0 , 它为 $A_0^2 = \frac{1}{4\sqrt{2}}\eta$ 。由于式(3.95)或式(4.90)是一个波包型的孤子, 其包络波表示了一个粒子, 而质心的位置 $\langle x' \rangle$ 和它平方的平均值 $\langle x'^2 \rangle$ 在 $t' = 0$ 时的值可表示为

$$\langle x' \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x' |\phi_s(x')|^2 dx', \quad \langle x'^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x'^2 |\phi_s(x')|^2 dx'$$

用式(3.95)可求得它们为

$$\langle x' \rangle = 4\sqrt{2}\eta A_0^2 x'_0, \quad \langle x'^2 \rangle = \frac{A_0^2 \pi^2}{12\sqrt{2}\eta} + 4\sqrt{2}A_0^2 \eta x'^2_0 \quad (4.91)$$

这里 $x' = x\sqrt{2m}/\hbar$, $t' = t/\hbar$ 。相类似, 微观粒子的质心的动量从式(4.90)和

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p |\phi_s(p)|^2 dp, \quad \langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 |\phi_s(p)|^2 dp$$

中可求得

$$\langle p \rangle = 16A_0^2 \eta \xi, \quad \langle p^2 \rangle = \frac{32\sqrt{2}}{3} A_0^2 \eta^3 + 32\sqrt{2} A_0^2 \eta \xi^3 \quad (4.92)$$

则相应的坐标偏差为 $\Delta x' = \sqrt{\langle x'^2 \rangle - \langle x' \rangle^2}$ 和动量偏差 $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$, 可求得

$$\begin{aligned} (\Delta x')^2 &= A_0^2 \left[\frac{\pi^2}{12\eta} + 4\eta x'^2_0 (1 - 4\sqrt{2}\eta A_0^2) \right] = \frac{\pi^2}{96\eta^2} \\ (\Delta p)^2 &= 32\sqrt{2} A_0^2 \left[\frac{1}{3} \eta^3 + \eta \xi^3 (1 - 4\sqrt{2}\eta A_0^2) \right] = \frac{8}{3} \eta^2 \end{aligned} \quad (4.93)$$

于是可得到坐标与动量之间的测不准关系的最终结果为

$$\Delta x' \Delta p = \pi/6 \quad (4.94)$$

此关系不依赖于微观粒子的特性, 因为它与粒子的特征参量无关。这表明最小测不准关系反映了微观粒子的本质特点。如果将 x' 用 x 表示, 则在式(4.89)中的 $1/\sqrt{2\pi}$ 应当用 $\sqrt{2\pi\hbar}$ 代替, 即

$$\phi_s(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi_s(x, t) e^{-ipx/\hbar} dx$$

则相应的测不准关系应为

$$\Delta x \Delta p = \frac{\pi\hbar}{6} = \frac{h}{12} \quad (4.95)$$

这个测不准关系不同于线性量子力学中的关系式(4.64)或式(4.71), 它称为最小测不准关系。这个最小值意味着它们的偏差如 Δx 或 Δp 总是有限的, 不可能趋于无穷大。于是也表明在非线性量子力学中, 不论在坐标空间还是在动量空间中微观粒子总是局域在一个有限空间中, 可表现出波-粒二象性的特性。因此, 它不同于线性量子力学中的 $\Delta x \Delta p > \hbar/2$ 关系。

4.7.3 在相干态和压缩态中的微观粒子的测不准关系

显然, 一般的相干态可写成

$$|\alpha\rangle = \exp(\alpha\hat{b}^+ - \alpha^*\hat{b})|0\rangle = e^{-\alpha^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n-1}} \hat{b}^{+n} |0\rangle$$

它是大量粒子(量子)的相干叠加的结果。在这个态中粒子的坐标和动量算符的平均值为

$$\langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(\alpha + \alpha^*), \quad \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = i\sqrt{\hbar m\omega}(\alpha - \alpha^*)$$

和

$$\langle\alpha|\hat{x}^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar}{2\omega m}(\alpha^{*2} + \alpha^2 + 2\alpha\alpha^* + 1), \quad \langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle = \frac{\hbar\omega m}{2}(\alpha^{*2} + \alpha^2 - 2\alpha\alpha^* - 1)$$

这里

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}}(\hat{b} + \hat{b}^+), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}}(\hat{b}^+ - \hat{b})$$

而 \hat{b}^+ (\hat{b}) 是微观粒子(量子)的产生(消灭)算符。 α 和 α^* 是一些待定的函数, ω 是粒子的频率, m 是它的质量。于是能得到最小测不准关系:

$$(\Delta x)^2 = \frac{\hbar}{2\omega m}, \quad (\Delta p)^2 = \frac{\hbar\omega m}{2}, \quad \langle\Delta x\rangle^2 \langle\Delta p\rangle^2 = \frac{\hbar^2}{4} \quad (4.96)$$

$$\frac{\Delta x}{\Delta p} = \frac{1}{\omega m} \quad \text{或} \quad \Delta p = (\omega m)\Delta x$$

对于两量子相干态或量子的压缩态, $|\beta\rangle = \exp[\beta(b^{+2} - b^2)]|0\rangle$, 这里 β 是与压缩效应相关的参数, 并有 $|\beta| < 1$ 。按上述方式, 可求出

$$\langle\beta|\Delta x^2|\beta\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}e^{4\beta}, \quad \langle\beta|\Delta p^2|\beta\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}e^{-4\beta}$$

于是可得到最小测不准关系为

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}, \quad \frac{\Delta x}{\Delta p} = \frac{1}{m\omega}e^{8\beta} \quad \text{或} \quad \Delta p = \Delta x(\omega m)e^{-8\beta} \quad (4.97)$$

这表明相对于单量子相干态而言, 在压缩态中的微观粒子的动量是被压缩, 坐标是被伸长。从式(4.96)和式(4.97)可知, 不论相干态还是压缩态都和非线性量子力学系统的微观粒子一样, 满足动量和坐标的测度变化的最小不确定关系。这种关系与粒子本身的特性是无关的。只与它的量子特性相关(因为它们都相关于普朗克量子常数)。从这里可看到处于相干态和压缩态中的粒子是服从非线性量子力学的定则, 而不满足线性量子力学的规律。从这个意义上讲, 相干态和压缩态是一个非线性量子效应, 在其粒子之间的相干或压缩特征是由于受了一种非线性相互作用的结果。正因为如此, 许多非线性量子力学系统中的微观粒子的状态波函数都是用一个相干态来表示。还可证明微观粒子的相干态不会随时间或粒子的运动而改变的。事实上, 根据量子理论, 与时间相关谐振子的相干态可表示为

$$\begin{aligned}
|\alpha, t\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\alpha\rangle = e^{-i\omega\left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2}\right)t} |\alpha\rangle = e^{-i\omega t/2 - |\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n e^{-i n \omega t}}{\sqrt{n!}} |n\rangle \\
&= e^{-i\omega t/2} |\alpha e^{-i\omega t}\rangle \quad (|n\rangle = (b^\dagger)^n |0\rangle)
\end{aligned}$$

这就表明了相干态在运动中能够保持不变, 这与在非线量子力学中的微观粒子或孤子的特性相同。其粒子的坐标在这种与时间相关的相干态中的平均位置可写成

$$\begin{aligned}
\langle \alpha, t | \hat{x} | \alpha, t \rangle &= \langle \alpha | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{x} e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \alpha \rangle = \left\langle \alpha \left| \hat{x} - \frac{it}{\hbar} [x, \hat{H}] + \frac{(-it)^2}{2!\hbar^2} [[\hat{x}, \hat{H}], \hat{H}] + \dots \right| \alpha \right\rangle \\
&= \left\langle \alpha \left| \hat{x} + \frac{\hat{p}t}{m} - \frac{1}{2!} t^2 \omega^2 \hat{x} + \dots \right| \alpha \right\rangle = \left\langle \alpha \left| x \cos \omega t + \frac{p}{m\omega} \sin \omega t \right| \alpha \right\rangle \\
&= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\alpha| \cos(\omega t + \theta) \tag{4.98}
\end{aligned}$$

式中, $\theta = \arctan(y/x)$, $x + iy = \alpha$, $[\hat{x}, \hat{H}] = i\hbar\hat{p}/m$, $[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar m\omega^2 \hat{x}$

现把式(4.98)与经典谐振子的解相比较, 而后者为

$$x = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \cos(\omega t + \theta), \quad E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

则可得到 $E = \hbar\omega\alpha^2 = \langle \alpha | \hat{H} | \alpha \rangle - \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle$, $\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger \hat{b} + \frac{1}{2}\right)$

由此可以看出, 相干态波包质心的运动确实服从经典规律。这也相同于在非线量子力学中微观粒子的运动规律, 这再一次肯定了相干态的非线性特性。

相类似, 也能得到

$$\begin{aligned}
\langle \alpha, t | \hat{p} | \alpha, t \rangle &= -\sqrt{2m\hbar\omega} |\alpha| \sin(\omega t + \theta), \quad \langle \alpha, t | \hat{x}^2 | \alpha, t \rangle = \frac{2\hbar}{\omega m} \left[|\alpha|^2 \cos^2(\omega t + \theta) + \frac{1}{4} \right] \\
\langle \alpha, t | \hat{p}^2 | \alpha, t \rangle &= 2m\hbar\omega \left[|\alpha|^2 \sin^2(\omega t + \theta) + \frac{1}{4} \right], \quad [\Delta x(t)]^2 = \frac{\hbar}{2\omega m}, \quad [\Delta p(t)]^2 = \frac{1}{2} m\omega\hbar
\end{aligned}$$

则也可得到最小测不准关系为

$$\Delta x(t) \Delta p(t) = \hbar/2$$

它相同于式(4.95)。这表明处于相干态中的粒子的坐标和动量之间最小测不准关系不会因运动和时间的变化而改变, 即与时间无关。这反映了微观粒子的本质。相干态所具有的以上特性很类似于在非线量子力学中由非线性 **Schrödinger** 方程、 ϕ^4 场方程和 **Sine-Gordon** 方程描述的微观粒子的特点。实际上, 在非线量子力学中常用相干态来描述微观粒子, 例如在蛋白质分子激发的激子状态的 **Davydov** 的 $|D_1\rangle$ 和 $|D_2\rangle$ 表

示式和庞小峰的准相干两量子态；在电-声子耦合系统的庞小峰的相干与压缩状态波矢，以及超导态的 BCS 波函数等也都是如此。由此可知，相干态是由非线性相互作用引起的，是属于一种非线性量子效应，而不应归为线性量子力学。实际上，相干态是不可能用平面波、de Broglie 波或 Bloch 波等线性波叠加而成的。

4.7.4 在非线性量子力学的量子涨落效应的特点

首先来讨论相干态的量子涨落效应。从以上关系可以求出在相干态中所包含的粒子数为

$$\bar{n} = \langle \alpha | \hat{N} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hat{b}^\dagger \hat{b} | \alpha \rangle = \alpha^2, \quad \langle \alpha | \hat{N}^2 | \alpha \rangle = |\alpha|^4 + |\alpha|^2$$

则在相干态中的粒子数的量子涨落值为

$$\Delta n = \sqrt{\langle \alpha | \hat{N}^2 | \alpha \rangle - \left(\langle \alpha | \hat{N} | \alpha \rangle \right)^2} = |\alpha|$$

于是有

$$\frac{\Delta n}{\bar{n}} = \frac{1}{|\alpha|} \ll 1 \quad (4.99)$$

这结果表明处于相干态的粒子的量子涨落效应是非常小的，即它处于一种稳定状态中。就其波动性而言，它是一种稳定波，类似于经典波动。

现在研究非线性量子力学中微观粒子的量子涨落效应。如果要求式(3.95)和式(4.90)中的状态波函数 $\phi_s(x, t)$ 和 $\phi_s(p, t)$ 满足相容性条件，则应有 $\phi_s(0) \approx 0$ 。对于由式(3.95)表示的粒子，若选择 $\xi = 140$, $\eta = \sqrt{300/0.253}/2\sqrt{2}$ 和 $\bar{x}_0 = 0$ ，则可得到 $\phi_s(0) \approx 10^{-6}$ ，这意味着它满足相容性条件。由式(4.93)~式(4.94)可求得 $\Delta x \approx 0.026$ 24 和 $\Delta p \approx 19.893$ 。这个结果表明微观粒子的动量和坐标的涨落效应较小，在一定程度内是可以同时近似确定的。这显然是由于它的波动性造成的。

4.7.5 由量子涨落效应所引起的微观粒子状态的不确定性

对于由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子，Lai 和 Haus 等人用量子理论讨论了这个问题。根据在 3.4 节建立的量子化理论，对于一个由玻色量子（如声子和光子）数 n 和粒子质心动量 P 标志的量子束缚态 $|n, P\rangle$ 的叠加，在玻色子数的平均值较大时，可以用来给出微观粒子（孤子）场的期待值。则可称由 $|n, P\rangle$ 叠加形成的态为基础孤子态。在非线性量子力学的量子化理论中，场方程和相应的对易关系是由式(3.43)和式(3.44)给出，其相应的量子哈密顿量由式(3.46)所表示。在 Schrödinger 表象中，相应的表示式由式(3.47)和式(3.48)及式(3.49)表示。对于一个多粒子状态 $|\phi'\rangle$ ，可从式(3.54)给出的 n 粒子态的基础上建立起这个基础态。则后者描述了一个具有 δ -相互作用势的玻色子系统。此时的 \hat{H} 由式(3.48)表示，粒子数算符

$$\hat{N} = \int \hat{\phi}^+(x) \hat{\phi}(x) dx \quad (4.100)$$

$$\text{和动量算符为} \quad \hat{P} = i \frac{\hbar}{2} \int \left[\frac{\partial}{\partial x} \hat{\phi}^+(x) \hat{\phi}(x) - \hat{\phi}^+(x) \frac{\partial}{\partial x} \hat{\phi}(x) \right] dx \quad (4.101)$$

Lai 等人证明了在此情况下它们有共同的本征态，在式(3.155)中如果 b 是正值，则这些玻色子之间的相互作用是吸引的，其哈密顿系统有束缚态。这些束缚态的子集可用 \hat{N} 和 \hat{P} 的本征值来标志，即

$$f_{n,p} = N_n \exp \left(ip \sum_{j=1}^{\infty} x_j + \frac{b}{2} \sum_{1 \leq i,j < n} |x_i - x_j| \right) \quad (4.102)$$

$$\text{式中,} \quad N_n = \sqrt{\frac{(n-1)! |b|^{n-1}}{2\pi}}$$

$$\text{于是有} \quad f_n(x_1, \dots, x_n, t) = \int dp g_n(p) f_{n,p}(x_1, \dots, x_n, t) e^{-iE(n,p)t} \quad (4.103)$$

$$\text{式中,} \quad g_n = \sqrt{g(p)} e^{-ipx_0} \quad \text{和} \quad g(p) = \frac{c\phi \{ -(p-p_0)^2 / [2(\Delta p)^2] \}}{\sqrt{2\pi(\Delta p)^2}}$$

使用在式(4.102)中的 $f_{n,p}$ ，可求出 $|n, P\rangle$ 态随玻色子对之间的距离的增加而指数衰减的特征。也可以证明 $|n, P\rangle$ 态描述了动量为 $P = \hbar np$ 和能量 $E(n, p) = np^2 - |b|^2 (n^2 - 1)n/12$ 的 n -量子孤子的状态及其运动特征。通过重构，在这个波函数中的量子数 n 是相关于相互作用的 n 个玻色子的质心动量。这个质心现定义为

$$\hat{X} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int x \hat{\phi}^+(x) \hat{\phi}(x) dx (\varepsilon + \hat{N})^{-1} \quad (4.104)$$

$$\text{并有} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \quad (4.105)$$

关于 $\varepsilon \rightarrow 0$ 的极限是被引入去规定相对于真空态的位置标符。

现在研究相对于一个具有大的平均玻色子数和已确定的平均场的 $|\Phi(t)\rangle$ 态的和由式(4.100)、式(4.101)和式(4.102)表示的物理量的量子涨落。Kartner 和 Boiven 把这个场算符分解为它的平均值和与量子涨落相关的余数，即

$$\hat{\phi}(x) = \langle \Phi'(0) | \hat{\phi}^+(x) | \Phi'(0) \rangle + \hat{\phi}_1(x),$$

$$[\hat{\phi}_1(x), \hat{\phi}_1^+(x')] = \delta(x - x'), [\hat{\phi}_1(x), \hat{\phi}_1^+(x')] = 0 \quad (4.106)$$

由于在 Schrödinger 表象中场算符 $\hat{\phi}$ 是与时间无关的，则可选择 $t = 0$ 。将式(4.106)代入式(4.100)、式(4.101)和式(4.104)中，并忽略与噪声算符的二阶相关项后，得到

$$\hat{N} = n_0 + \Delta \hat{n}, \quad n_0 = \int dx \left(\langle \hat{\phi}^+(x) | \langle \hat{\phi}(x) \rangle \right), \quad \Delta \hat{n} = \int dx \left(\langle \hat{\phi}^+(x) | \hat{\phi}_1(x) \rangle + \text{c.c.} \right)$$

$$\hat{P} = \hbar n_0 p_0 + \hbar n_0 \Delta \hat{p}, \quad p_0 = \frac{i}{n_0} \int dx \langle \hat{\phi}_x^+(x) \rangle \langle \hat{\phi}(x) \rangle, \quad \Delta \hat{p} = \frac{i}{n_0} \int dx \langle \hat{\phi}_x^+(x) \rangle \hat{\phi}_1(x) + \text{c.c.}$$

$$\hat{X} = x_0 \left(1 - \frac{\Delta \hat{n}}{n_0} \right) + \Delta \hat{x}, \quad x_0 = \frac{1}{n_0} \int dx x \langle \hat{\phi}^+(x) \rangle \langle \hat{\phi}(x) \rangle, \quad \Delta \hat{x} = \frac{1}{n_0} \int dx x \langle \hat{\phi}^+(x) \rangle \hat{\phi}_1(x) + \text{c.c.}$$

式中, $\Delta \hat{x}$ 是位置标符对平均值的偏离; $\Delta \hat{n}$, $\Delta \hat{p}$ 和 $\Delta \hat{x}$ 是噪声算符的线性项部分。由于 $\hat{\phi}_1$ 和 $\hat{\phi}_1^+$ 的第三阶和 4 阶修正项很小, 则在 n_0 很大时, 可以忽略它们。于是 $\Delta \hat{n}$, $\Delta \hat{p}$ 和 $\Delta \hat{x}$ 都包含有共轭变量 $\Delta \hat{p}$ 和 $\Delta \hat{x}$ 的噪声算符的相移。为了推出其关系, 这里引入对于 $\Delta \hat{n}$ 的共轭相移算符 θ 的涨落为

$$\Delta \hat{\theta} = \frac{1}{n_0} \int \left\{ i \left[\langle \hat{\phi}^+(x) \rangle + x \langle \hat{\phi}_x^+(x) \rangle \right] - p_0 x \langle \hat{\phi}_x^+(x) \rangle \right\} \hat{\phi}_1(x) dx + \text{c.c.} \quad (4.107)$$

如果传播的距离不是太长, 则场的平均值可用经典孤子解的第一阶项表示, 即为

$$\langle \hat{\phi}(x) \rangle = \phi_{0,n_0}(x, t) \left[1 + O\left(\frac{1}{n_0}\right) \right]$$

式中,

$$\phi_{0,n_0}(x, t) = \frac{n_0 \sqrt{|b|}}{2} \exp \left[i \Omega_{nl} t - i p_0^2 t + i p_0 (x - x_0) + i \theta_0 \right] \cdot \operatorname{sech} \left[\frac{n_0 |b|}{2} (x - x_0 - 2 p_0 t) \right] \quad (4.108)$$

其非线性相移为 $\Omega_{nl} = n_0^2 |b|^2 t / 4$ 。如果 $p_0 = x_0 = \theta_0 = 0$, 则可得到在 Heisenberg 表象中的涨落算符为

$$\begin{aligned} \Delta \hat{n}(t) &= \int [f_{-n}(x)^* F'_{nl} + \text{c.c.}] dx, & \Delta \hat{\theta}(t) &= \int [f_{-\theta}(x)^* F'_{nl} + \text{c.c.}] dx \\ \Delta \hat{p}(t) &= \int [f_{-p}(x)^* F'_{nl} + \text{c.c.}] dx, & \Delta \hat{x}(t) &= \int [f_{-x}(x)^* F'_{nl} + \text{c.c.}] dx \end{aligned}$$

式中,

$$F'_{nl} = e^{i \Omega_{nl}} \hat{\phi}_1(x, t)$$

$$f_{-n}(x) = \frac{n_0 \sqrt{|b|}}{2} \operatorname{sech}(x_{n_0}), \quad f_{-\theta}(x) = \frac{i \sqrt{|b|}}{2} \left[\operatorname{sech}(x_{n_0}) + x_{n_0} \frac{d}{dx_{n_0}} \operatorname{sech}(x_{n_0}) \right]$$

$$f_{-p}(x) = -\frac{i n_0 \sqrt{|b|^3}}{4} \frac{d}{dx_{n_0}} \operatorname{sech}(x_{n_0}), \quad f_{-x}(x) = \frac{1}{n_0 \sqrt{|b|}} x_{n_0} \operatorname{sech}(x_{n_0})$$

其中,

$$x_{n_0} = \frac{1}{2} n_0 |b| x$$

对于由下式定义的相关态,

$$\hat{\phi}(x) |\Phi_{0,n_0}\rangle = \phi_{0,n_0}(x) |\Phi_{0,n_0}\rangle, \quad \hat{\phi}_1(x) |\Phi_{0,n_0}\rangle = 0$$

式中,
$$|\Phi_{0,n_0}\rangle = \exp\left\{\int\left[\phi_{0,n_0}(x)\hat{\phi}^+(x) - \phi_{0,n_0}^*(x)\hat{\phi}^-(x)\right]dx\right\}|0\rangle$$

其中 ϕ_{0,n_0} 由式 (4.108) 给出。于是 Kartner 等人求得

$$\langle\Delta\hat{n}_0^2\rangle = n_0, \quad \langle\Delta\hat{\theta}_0^2\rangle = \frac{0.6075}{n_0}, \quad \langle\Delta\hat{p}_0^2\rangle = \frac{1}{3n_0\tau_0^2}, \quad \langle\Delta\hat{x}_0^2\rangle = \frac{1.645\tau_0^2}{2n_0}$$

式中, $\tau_0^2 = 2/n_0|b|$ 是微观粒子 (孤子) 的宽度。由此可分别求出玻色子数和相位与动量和位置的涨落的测不准关系为

$$\langle\Delta\hat{n}_0^2\rangle\langle\Delta\hat{\theta}_0^2\rangle = 0.6075 \geq 0.25, \quad n_0^2\langle\Delta\hat{p}_0^2\rangle\langle\Delta\hat{x}_0^2\rangle = 0.27 \geq 0.25$$

于是可知相干态的量子涨落是白色的, 即 $\langle\hat{\phi}_1^+(x)\hat{\phi}_1^+(y)\rangle = \langle\hat{\phi}_1^+(x)\rangle\langle\hat{\phi}_1^+(y)\rangle = 0$ 。但是, 因微观粒子 (孤子) 之间存在相互作用, 则它们的量子涨落不能是白色的, 于是 Kätner 和 Boivin 假设基础孤子态的玻色子数具有一个 Poissonian 分布 $p_n = \frac{n_0^n}{n!}e^{-n_0}$, 而它的

动量是具有宽度为 $\langle\Delta p_0^2\rangle = n_0|b|^2/4\mu$ 的高斯动量分布式, 这里 μ 是一个可与 n_0 相比拟的单位阶数参数。最后, 他们得到了对应于微观粒子相位和位置的初始涨落在保留其 $1/n_0$ 量级时的最小测不准值, 它们为

$$\langle\Delta\hat{\theta}_0^2\rangle = \frac{0.25}{\langle\Delta\hat{n}^2\rangle} = \frac{0.25}{n_0}\left[1 + O\left(\frac{1}{n_0}\right)\right] \text{ 和 } \langle\Delta\hat{x}_0^2\rangle = \frac{0.25}{\langle n_0^2\Delta\hat{p}^2\rangle} = \frac{0.25\mu\tau_0^2}{n_0}\left[1 + O\left(\frac{1}{n_0}\right)\right] \quad (4.109)$$

由此可以得出

$$\langle\Delta\hat{\theta}_0^2\rangle\langle\Delta\hat{n}_0^2\rangle = 0.25\left[1 + O\left(\frac{1}{n_0}\right)\right], \quad n_0^2\langle\Delta p_0^2\rangle\langle\Delta\hat{x}_0^2\rangle = 0.25\left[1 + O\left(\frac{1}{n_0}\right)\right] \quad (4.110)$$

这就是由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的量子涨落效应。它与式 (4.95) 很类似。由此得出在非线性量子力学中物理量之间的量子涨落是取其最小值。但庞小峰在电-声子耦合系统中用 Hostein 模型和用自己提出的在单声子相干态和两声子压缩态之间有相关的状态波矢求出了声子的最测不准关系与粒子的状态参量有关。这使我们更清楚认识到最小测不准关系的本质。

由于在非线性量子力学中存在有一个最小测不准关系, 则可以把客观世界按测不准关系分成三个不同层次。如果 $\Delta x\Delta p > h/2$, 则可以用线性量子力学来描述的微观

客体。如 $\Delta x\Delta p = 0$, 则它相应于可用经典定律来描写的宏观世界。在中间即

$\Delta x\Delta p = h/2$ 或 $h/12$ 的物理系统是属于用非线性量子力学描述的微观世界或介观系

统。在前者，微观粒子仅具有波动性，在宏观世界中的粒子仅具有颗粒性，在它们之间的非线性量子系统中的微观粒子既具有粒子性，又具有波动性，即具有波-粒二象性。因此新的非线性量子力学理论搭起了一个桥梁，将使用线性量子力学描写的微观世界与经典宏观世界有机地联系起来。

习题

1. 运用 Galilean 变换: $x \rightarrow x'' = x - vt, t \rightarrow t'' = t, \phi(x, t) \rightarrow \phi'(x, t'')e^{-iax''t'' - a^2t''^3/3}$ 求解在 $V(x) = \alpha x$ 时 $i\hbar\phi_t + \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{xx} + b|\phi|^2\phi + V(x)\phi = 0$ 的孤子解，并用式 (4.25) 和式 (4.37) 解出此微观粒子的相速度和群速度及孤立波的波长和频率，并解出此种情况下的哈密顿方程和对应的正则变量。

2. 如果粒子的状态用函数 $\phi(x) = \left(\frac{1}{2\pi\xi^2}\right)^{\frac{1}{2}} e^{\left[\frac{i}{\hbar}px - \frac{x^2}{4\xi^2}\right]}$ 表示，这里 ξ 是一常数。利用它求出其测不准关系 $\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = ?$

3. 如果微观粒子的状态用 $\phi(x, t) = 4\sqrt{2/bk}e^{-2K(x-vt)}e^{i(px-Et)/\hbar}$ 描写，试求出 $\overline{(\Delta x)^2} \cdot \overline{(\Delta p)^2} = ?$ 并和上题的结果比较，以此来阐明其物理含义。

第 5 章 非线性微观粒子的碰撞和相互作用特性

本章研究了两个或多个微观粒子的相互碰撞、散射和相互作用的特点，通过研究在碰撞前后和碰撞过程中的状态和特性的变化得知它们既具有经典粒子的特性，又具有波动的特性。因此，借助于这些研究来进一步证明在非线量子力学中的微观粒子所具有的波-粒二象性。

5.1 微观粒子相互碰撞的特性

5.1.1 具有吸引非线性相互作用的 ($b > 0$) 的非线性 Schrödinger 方程的微观粒子的碰撞特征

现在，首先研究由 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.155) 描述的微观粒子的碰撞特性。解决这个问题一个途径是采用反散射方法。因为此方法刚好涉及粒子的碰撞与散射问题。如在第 3 章所述，Zakharov 和 Shabat 利用反散射方法和 Lax 表示建立了相应于式 (3.155) 的 ZS 方程式 (3.28) 或式 (3.85)。在第 3 章给出了在非线方程式 (3.155) 中 $b > 0$ 对应的 ZS 方程的特征函数 $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ 和相应的特征值 λ 或 k 值，并由此给出了非线性 Schrödinger 方程式 (3.155) 的解，它为式 (3.95) 或式 (3.156) 所示。

为了研究微观粒子(孤子)之间的碰撞特征，Zakharov 和 Shabat 又求出了式 (3.155) 的 N -孤子解。跟随式 (3.85) ~ 式 (3.96) 的研究结果，它可表示为

$$|\phi(x', t')|^2 = \sqrt{2b} \frac{d^2}{dx^2} \ln(\det \|B'B'^* + I\|) \quad (5.1)$$

式中， $B'_{ij} = \sqrt{\frac{c_j c_k^*}{\zeta_j - \zeta_k^*}} e^{ix'(\zeta_j - \zeta_k^*)}$ 是 $j \times k$ 型的 B' 行列式 $\|\cdot\|$ 的一个元素， $\zeta_j = \xi_j + i0$,

$c_j(t') = c_j(0) e^{i4\xi_j^2 t'}$ 。其本征值为

$$\lambda_j(t', x') = \lambda_j(0) \exp \left\{ -\eta_j(x' + 4\xi_j t') + i \left[\xi_j x' + 2(\xi_j^2 - \eta_j^2) t' \right] \right\} \quad (5.2)$$

$$\text{和} \quad |\lambda_j(t', x')| = |\lambda_j(0)| \exp \left[-\eta_j(x' + 4\xi_j t') \right] \quad j = 1, 2, \dots, N \quad (5.3)$$

这里 η_j 是决定孤子振幅的一个参量。在这种情况下，对于本征函数 $\psi = (\psi_{1j}, \psi_{2j})$ 中

的 $j=m$ 的两个分量 ψ_{1m} 和 ψ_{2m} 满足的 ZS 方程, 但在碰撞后的 $t' \rightarrow \infty$ 的情况下, 经过运算可最终表示为

$$\psi_{1m} + \frac{|\lambda_m^+|^2}{2i\eta_m} \psi_{2m}^* = 0, \quad \frac{|\lambda_m^+|^2}{2i\eta_m} \psi_{1m} + \psi_{2m}^* = (\lambda_m^+)^* \quad (5.4)$$

式中, $\lambda_m^+ = \lambda_m \prod_{p=m+1}^N \frac{\zeta_m - \zeta_p}{\zeta_m - \zeta_p^*}$, $\psi_m = \begin{pmatrix} \psi_{1m} \\ \psi_{2m} \end{pmatrix} = \sqrt{c_m} \psi(x', \zeta)$, $\lambda_m = \sqrt{c_m} \exp(i\zeta_m x')$ (5.5)

我们能够求出由以上方程中的 ψ_{1m} 和 ψ_{2m} 决定的式 (3.155) 的孤子之间的碰撞特性, 其碰撞后产生的粒子质心 x_{0m}^+ 和相位 θ_m^+ 相对于原始值的 x_{0m}' 和 θ_{0m} 的移动可表示为

$$x_{0m}^+ - x_{0m}' = \frac{1}{\eta_m} \prod_{p=m+1}^N \left| \frac{\zeta_m - \zeta_p}{\zeta_m - \zeta_p^*} \right| < 0 \quad (5.6)$$

$$\theta_m^+ - \theta_m = -2 \prod_{p=m+1}^N \arg \left(\frac{\zeta_m - \zeta_p}{\zeta_m - \zeta_p^*} \right) \quad (5.7)$$

对于 $t' \rightarrow -\infty$ 的过程也可得到类似结果。由此可求出

$$\lambda = \lambda_m^- = \lambda_m \prod_{p=1}^{m-1} \frac{\zeta_m - \zeta_p}{\zeta_m - \zeta_p^*} \quad (5.8)$$

由于在此情况下粒子的振幅和速度都是一个常数, 因此在两粒子碰撞后的质心位置和相位的移动便可称为相移, 并且都是一个常数。所谓相移就是碰撞的粒子在碰撞后发生了在时空上的移动, 此时其他特性未改变的现象。于是能将这种粒子的碰撞过程描绘如下: 在 $t' \rightarrow -\infty$ 时, 慢粒子在前, 快粒子在后; 在 $t=0$ 时, 它们相遇而发生碰撞。在 $t' \rightarrow +\infty$ 时, 快粒子运动到最前面, 慢粒子紧跟其后。此时, 两个粒子的质心位置和相位的差值 $\Delta x_{0m}'$ 和 $\Delta \theta_m$ 可分别表示为

$$\Delta x_{0m}' = x_{0m}^+ - x_{0m}' = \frac{1}{\eta_m} \left(\sum_{k=m+1}^N \ln \left| \frac{\zeta_m - \zeta_k}{\zeta_m - \zeta_k^*} \right| - \sum_{k=1}^{m-1} \ln \left| \frac{\zeta_m - \zeta_k}{\zeta_m - \zeta_k^*} \right| \right) \quad (5.9)$$

$$\Delta \theta_m = \theta_m^+ - \theta_m = 2 \prod_{k=1}^{m-1} \arg \left(\frac{\zeta_m - \zeta_k}{\zeta_m - \zeta_k^*} \right) - 2 \prod_{k=m+1}^N \arg \left(\frac{\zeta_m - \zeta_k}{\zeta_m - \zeta_k^*} \right) \quad (5.10)$$

这里式 (5.9) 表示了碰撞是成对进行的。在碰撞过程中, 快粒子朝前运动了 $\eta_m^{-1} \cdot \ln \left| (\zeta_m - \zeta_k^*) / (\zeta_m - \zeta_k) \right|$ 的距离 (这里 $\zeta_m > \zeta_k$), 但慢粒子向后仅移动了 $\eta_k^{-1} \ln \left| (\zeta_m - \zeta_k^*) / (\zeta_m - \zeta_k) \right|$ 的距离。于是, 它们两个粒子的质心相差刚好为式 (5.9)。在无多粒子碰撞过程发生的情况下, 这两粒子碰撞的特征与经典粒子的碰撞过程相似, 从而证明了

由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子满足经典粒子的碰撞规则，其本身显示了粒子的经典特性。

5.1.2 在碰撞过程中的特性

虽然在非线性量子力学中的微观粒子的碰撞效应具有经典粒子的特征，但在本质上不同于后者，这是因为微观粒子本身还具有波动性。这注定了在碰撞过程中的情况是十分复杂的，即在这中会出现波的叠加和相互间作用能的交换等所形成的复合状况。Desein 和 Chu 等人研究过这个情况。他们根据 Zakharov 和 Shabat 描绘的微观粒子碰撞特性，推出了由方程式 (3.155) 描述的，对应于两个分立的本征值 $\lambda_{1,2}$ 的两个微观粒子在碰撞过程中，由于相互作用所形成的复合状态，它可表示为

$$\phi(x', t') = \frac{|\alpha_1| \cosh(a_1 + i\theta_1) e^{i\theta'_1} + |\alpha_2| \cosh(a_2 + i\theta_2) e^{i\theta'_2}}{\alpha_3 \cosh(a_1) \cosh(a_2) - \alpha_4 [\cosh(a_1 + a_2) - \cos(A')]} \quad (5.11)$$

这里 $\theta'_{1,2} = 2 \left[2(\eta_{1,2}^2 - \xi_{1,2}^2) t' - x' \xi_{1,2} \right] + (\theta'_0)_{1,2}$, $A' = \theta'_2 - \theta'_1 + (\theta_2 - \theta_1)$

$$a_{1,2} = 2\eta_{1,2} (x' + 4t' \xi_{1,2}) + (x'_0)_{1,2}, \quad |\alpha_{1,2}| e^{i\theta_{1,2}} = \pm \left\{ \left[\frac{1}{2\eta_{1,2}} - \frac{\eta}{(\Delta \xi^2 + \eta^2)} \right] \pm i \frac{\Delta \xi}{(\Delta \xi^2 + \eta^2)} \right\}$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{4\eta_1 \eta_2}, \quad \alpha_4 = \frac{1}{2(\eta^2 + \Delta \xi^2)}, \quad \lambda_{1,2} = \xi_{1,2} + i\eta_{1,2}, \quad \Delta \xi = \xi_2 - \xi_1, \quad \eta = \eta_1 + \eta_2 \quad (5.12)$$

此处 $(x'_0)_{1,2}$ 是两粒子的质心位置， $(\theta'_0)_{1,2}$ 是其相位，它们由初始条件决定。由这种碰撞所形成的状态相关于碰撞粒子的初始脉冲的形状。对于相位为 θ 的初始条件可表示成

$$\phi(0, x') = \text{sech}(x' - \bar{x}_0) + \text{sech}(x' + \bar{x}_0) e^{i\theta} \quad (5.13)$$

它描述了初始时刻相距为 $2\bar{x}_0$ ，相差为 θ 的两个粒子的状态。是它们之间的碰撞所产生的复合状态便可使用式 (5.11) 表示，其相应的本征值 $\zeta_{1,2}$ 及 a_0 和 θ'_0 能从 Zakharov-Shabat 方程式 (3.84) 和初始条件式 (5.13) 来求出。若将它们代入式 (5.11)，便可求出两个粒子相互碰撞时的特点。对于由式 (5.11) 给出的由两个初始粒子的碰撞所形成的状态可以认为是处在周期为 $\pi/(\eta_2^2 - \eta_1^2)$ ，并与 t' 有关的，形式为 $\cos A'$ 的周期势场中运动的两个粒子来相互作用的结果。在初始条件 $\theta = 0$, $\xi_1 = \xi_2 = 0$, $(\theta'_0)_1 = (\theta'_0)_2 = 0$ 时，Desem 和 Chu 等人用数值模拟的方法求出了由式 (5.13) 表示的两个初始粒子在碰撞时其状态随时间 t' 变化的传播特性，其结果如图 5.1 所示。可看出初始时分开为 $2\bar{x}_0$ 的两个粒子在 $A' = \pi$ 时结合为一个复合体，在此以后它们分开，并在 $A' = 2\pi$ 时又回复到初始状态。这种过程周而复始地进行。在此过程中，两个粒子之间分开的间距 $\Delta x'$ 可求出，大约为

$$\Delta x' = \ln \left[\frac{2}{a} |\cos(at')| \right] \quad a = 2e^{-\tilde{x}_0}$$

其状态的振荡的周期为 $t'_p = (\pi/2)e^{\tilde{x}_0}$ 。这就是两个微观粒子相互碰撞的具体图像。因此，出现的这种物理图像表征了微观粒子的波-粒二象性。

Tan B 等人将 $A(\phi) = 0$ ， $V(x) = \text{constant}$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 分解为以下两个方程：

$$i \frac{\partial \phi'}{\partial t'} + \frac{\partial^2 \phi'}{\partial x'^2} = \phi' u \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t'^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} (|\phi'|^2) \quad (5.15)$$

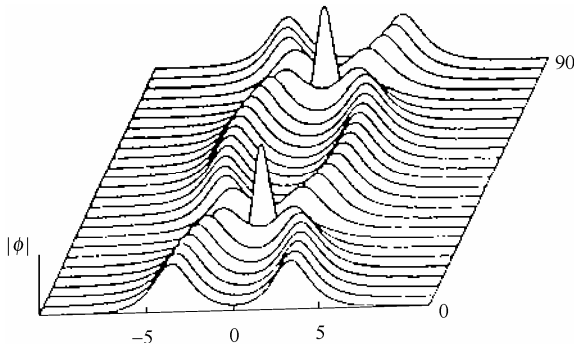


图 5.1 两个振幅相等的微观粒子的碰撞相互作用特性，初始时刻粒子分开 3.5 个粒子宽度

此时非线性系数 $b = 1/(1-v^2)$ ， v 为粒子的速度。可以把式 (5.14) ~ 式 (5.15) 的解写成

$$\phi' = \sqrt{2(1-v^2)} \eta \text{sech} [\eta(x' - x'_0 - vt')] \exp \left[\frac{i}{2} vx' - i(v^2/4 - \eta^2)t' + i\theta_1 \right] \quad (5.16)$$

$$u = -2\eta^2 \text{sech}^2 [\eta(x' - x'_0 - vt')] \quad (5.17)$$

式中， η 、 v 和 θ 等三个参数分别为粒子的振幅、速度和相位。在这个系统中存在 $N_s = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi'|^2 dx'$ 和 $E_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} u dx'$ 等两个运动常数。他们采用了具有 256 个空间离散基函数构成的傅里叶赝谱 (Fourier Pseudo-spectral) 方案，并与 4 阶 Runge-Kutta 方法结合在一起研究了初始时分开为 \tilde{x}_0 的，波形为

$$\begin{aligned}\phi' &= \sqrt{2(1-v_1^2)}\eta_1 \operatorname{sech}[\eta_1 x'] \exp\left[\frac{i}{2}v_1 x' + i\theta_1\right] + \\ &\quad \sqrt{2(1-v_2^2)}\eta_2 \operatorname{sech}[\eta_2(x' + \tilde{x}'_0)] \exp\left[-\frac{v_2^2}{2}(x'_2 + \tilde{x}'_0) + i\theta_2\right] \\ u &= -2\eta_1^2 \operatorname{sech}^2(\eta_1 x') - 2\eta_2^2 \operatorname{sech}^2[\eta_2(x' + \tilde{x}'_0)]\end{aligned}$$

的两个粒子之间的碰撞特性。在上式中的第一项表示孤子 1，第二项表示孤子 2。其数值模拟碰撞的结果表示在图 5.2 中。此时快和慢的两个粒子的速度比值固定为 1.8。

ϕ' 的绝对值用图中每对图的左边的等高线来表示， x' 是水平坐标，时间 t' 的向上表示增加，图的右边的值表示 u 的绝对值。相位的增加方向是从 0 (顶部) 到 $\pi/2$ (中部) 至 π (底部)。 θ_2 在每种情况下都增加 $\pi/2$ ，但在顶部时是 $\theta_2 = 0$ 。在碰撞前的 $\theta_2 = 0, \pi/2$ 和 π 的三种情况下，每个初始粒子为 N_s 贡献了 0.7600。当在相对相位等于 0 (顶部图) 时，碰撞的两个粒子自由穿过，在碰撞后无任何色散。在 $\theta_2 = \pi/2$ (中部图) 时，对 N_s 的贡献为 1.427 23，向左边运动的是速度较大的粒子。在碰撞后它以相同于初始孤子 2 的速度运动。但对 N_s 仅贡献 0.0928 的向右运动的速度较小的粒子，在碰撞后则以相同于孤子 1 的速度运动。当 $\theta_2 = \pi$ (图 5.2 的底部) 时，这两个粒子在碰撞时彼此反弹运动，碰撞后改变了其自身的运动方向。在 $\theta_2 = 3\pi/2$ 时的粒子运动特征刚好与 $\theta_2 = \pi/2$ 时的情况相反。因此，它们之间有如下关系：

$$\phi'\left(x', t', \theta_2 = \frac{3\pi}{2}\right) = \phi'\left(-x', t', \theta_2 = \frac{\pi}{2}\right), \quad u\left(x', t', \theta_2 = \frac{3\pi}{2}\right) = u\left(-x', t', \theta_2 = \frac{\pi}{2}\right)$$

因此，这种碰撞特征也很类似于经典粒子的情况。

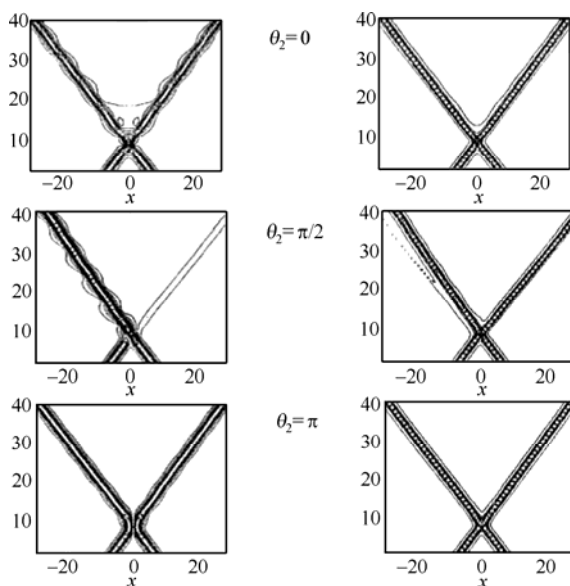


图 5.2 两个微观粒子的碰撞特性。在这一碰撞过程中，快粒子和慢粒子的初始速度的比值为 1.8

庞小峰用 4 阶 Runge-Kutta 方法数值模拟了非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 在 $V(x) = \text{constant}$ 和 $A(\phi) = 0$ 时，在分立化后所描述的两个粒子的孤立波的碰撞特征，其结果示于图 5.3 中。从这幅图可以清楚看出，初始时刻的两个粒子经过相对运动过一段的距离之后，在 $t = 0$ 时对碰。在碰撞后，彼此保持自己的振幅，相互穿过，并向前传播。这种碰撞过程很类似于宏观粒子之间的碰撞，但在交互碰撞中产生一个振幅很大的，类似于前面讲述的复合状态。这一结果再次显示出由非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的微观粒子具有的波-粒二象特性。

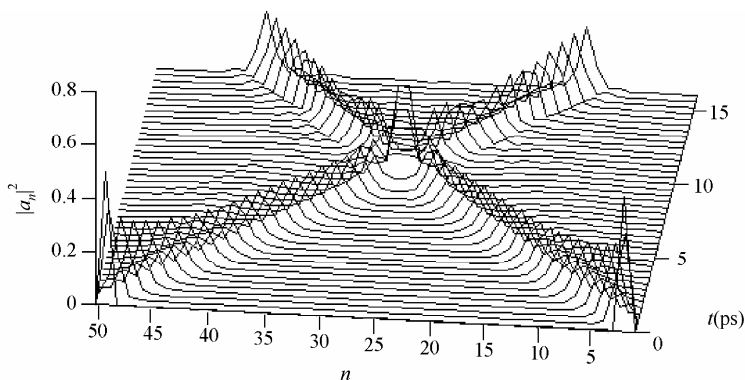


图 5.3 由非线性 Schrödinger 方程描述的两个粒子的孤立波的相互碰撞特征

5.2 微观粒子相互碰撞的基本规则及机理

5.2.1 具有排斥非线性相互作用 ($b < 0$) 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的两粒子的碰撞特性

在前面研究了 $b > 0$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的微观粒子的碰撞特征。由研究得知, 在 $V(x) = A(\phi) = 0$ 和 $b > 0$ 时的两个粒子的孤立波的碰撞就像经典粒子的碰撞一样, 在相互碰撞后能保持其稳定状况和波形不变的特征向前传播, 从而确立了孤子的稳定性和它的波-粒二象特性。但对于 $b < 0$ 的排斥型非线性相互作用的情况, 由此方程描述的是空穴粒子, 其解是一个暗孤子。因此, 它们的碰撞特征也有所不同, 所以有必要做深入研究。

Zakharov 和 Shabat 使用和以上相同的反散射方法求出了 $b < 0$ 时式 (3.155) 的解。在这个计算中, $(s^2 - 1)$ 和 $(s - 1)$ 分别代替了在 $b > 0$ 时的 $(1 - s^2)$ 和 $(1 - s)$, 其散射数据现有 $|a(\lambda)|^2 - |b(\lambda)|^2 = 1$ 的关系。对于满足在 $x' \rightarrow \pm\infty$ 时, 有 $|\phi(x', t')|^2 \rightarrow \text{constant}$ 和 $\phi_{x'} \rightarrow 0$ 特点的方程的解可表示为

$$\sqrt{\frac{b}{2}}\phi(x', t') = \frac{(\lambda - i\nu)^2 + \exp[2\nu(x' - x'_0) - 2\lambda t']}{1 + \exp[2\nu(x' - x'_0) - 2\lambda t']} \quad (5.18)$$

$$\text{于是有} \quad \frac{b}{2}|\phi(x', t')|^2 = 1 - \nu^2 / \left\{ \cosh^2(\nu(x' - x'_0) - 2\lambda t') \right\}, \quad \nu = \sqrt{1 - \lambda^2} \quad (5.19)$$

式中, 参数 ν 轴 λ 表示了微观粒子的振幅和速度; x'_0 是粒子在 $t' = 0$ 时的暗孤子状态的中心位置。可以证明具有本征值为 λ 的这类暗孤子的速度为 2λ 。应用与 5.1 节介绍的相类似的方法, Zakharov 和 Shabat 研究了两个粒子的碰撞。为此他们考虑了具有速度为 $2\lambda_2$ 和 $2\lambda_1$ 的两个粒子的相互碰撞。为了这个目的, 就必须得到相应的两孤子解。但这是困难的。于是考虑在 $t \rightarrow \pm\infty$ 时的渐近行为。此时, 两孤子解分裂为两个单个孤子, 即

$$\phi(x', t') \rightarrow \phi_0(x' - 2\lambda_1 t', \lambda_1, x_1^{'+}) + \phi_0(x' - 2\lambda_2 t', \lambda_2, x_2^{'+}) \quad t \rightarrow +\infty \quad (5.20)$$

$$\phi(x', t') \rightarrow \phi_0(x' - 2\lambda_1 t', \lambda_1, x_1^{i-}) + \phi_0(x' - 2\lambda_2 t', \lambda_2, x_2^{i-}) \quad t \rightarrow -\infty \quad (5.21)$$

经过这一散射后, 两粒子孤立波的质心和相位发生了相应的位移, 它们为 $\delta x_1' = x_1^{'+} - x_1^{i-}$, $\delta x_2' = x_2^{'+} - x_2^{i-}$ 。应用与 5.1 节类似的方法, Zakharov 和 Shabat 等人求出了两个此类粒子在碰撞之后发生的位移分别为

$$\delta x'_1 = \frac{1}{2v_1} \ln \left(\frac{1}{|a_2(\lambda_1, iv_1)|^2} \right) = \frac{Y}{2v_1} \quad (5.22)$$

$$\delta x'_2 = \frac{1}{2v_2} \ln \left(|a_1(\lambda_2, iv_2)|^2 \right) = -\frac{Y}{2v_2} \quad (5.23)$$

$$\text{式中, } Y = \ln \left[\frac{(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (v_1 + v_2)^2}{(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + (v_1 - v_2)^2} \right], \quad a_{1,2}(\lambda, v) = \frac{iv + \lambda - iv_{1,2} - \lambda_{1,2}}{iv + \lambda + iv_{1,2} + \lambda_{1,2}}$$

此式表明两个粒子碰撞后, 速度大的粒子有一个正的位移, 而速度小的粒子有一个负的位移, 这相当于它们之间有一个排斥作用存在。可得到它们的位移有以下关系:

$$v_1 \delta x'_1 + v_2 \delta x'_2 = 0 \quad (5.24)$$

这个关系首先由 Tsuzuki 从波色粒子的质心运动的式(3.155)在 $b < 0$ 时求出。当时他解释了这类粒子在相互碰撞时其质心动量是守恒的。这也显示了由式(3.155)在 $b < 0$ 时微观的粒子具有粒子的特性。

Zakharov 和 Shabat 等人求出了这两个粒子的碰撞过程是, 在 $t' \rightarrow -\infty$ 时, 快和慢的两个粒子由于运动速度不同而在 $t' = 0$ 时发生碰撞, 但在 $t' \rightarrow +\infty$ 时这两个粒子的运动顺序颠倒, 刚好与初始时相反。则碰撞后所产生位移的总和可表示成

$$\delta_j = x_j'^+ - x_j'^- = \sum_{i=1} \delta_{ij} \quad (5.25)$$

$$\text{式中, } \delta_{ij} = \text{sign}(\lambda_i - \lambda_j) \frac{1}{2v_i} \ln \left[\frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2 + (v_i + v_j)^2}{(\lambda_i - \lambda_j)^2 + (v_i - v_j)^2} \right]$$

因此, 这种碰撞过程与 $b > 0$ 时的情况相同。由此得出由非线性 Schrödinger 方程式(3.155)描述的微观粒子的相互碰撞类似于经典粒子的碰撞规律。

D. W. Aosey 等人在光纤中用由激光产生的、满足 Schrödinger 方程的两个光孤子来研究它们之间的相互碰撞特性。他们把 $b < 0$ 时的式(3.155)的暗孤子解写成

$$\phi(x', t') = \phi_0 [1 - B^2 \text{sech}^2(\xi')]^{1/2} \exp[\pm i f(\xi')] \quad (5.26)$$

$$\text{式中, } f(\xi') = \arcsin \left[\frac{B \tanh(\xi')}{[1 - B^2 \text{sech}^2(\xi')]^{1/2}} \right] \quad \xi' = k(x' - v_t t')$$

B 相当于这个暗孤子的振幅, 常取值于 $[-1, 1]$ 区间, 正比于孤子中心 x'_0 轴的无量纲传播速度。 k 是孤子的形状因子。暗孤子的强度 (I_d) 即辐照度的最小值的大小用 $B^2 \phi_0^2$ 来表示。R. N. Thurston 等人从光纤的研究中得到, k 和传播速度 v_t 分别为

$k^2 = n_0 |n_2| k_0^2 B^2 \phi_0^2$ 和 $v_i \approx \pm \left[(1 - B^2) \frac{|n_2| \phi_0^2}{n_0} \right]^{1/2}$ 。因此，它与孤子的“振幅” B 相关，而 n_0 和 n_2 分别是线性和 **Kerr** 非线性折射系数。若假设 $|n_2| \phi_0^2 \ll n_0$ 时，求得两个孤子在碰撞后的相对相移为

$$\delta x_j = \left[\frac{n_0}{|n_2| \phi_0^2} \right]^{1/2} \frac{1}{2k_0 n_0 B_j} \cdot \ln \left[\frac{\left[(1 - B_1^2)^{1/2} + (1 - B_2^2)^{1/2} \right]^2 + (B_1 + B_2)^2}{\left[(1 - B_1^2)^{1/2} + (1 - B_2^2)^{1/2} \right]^2 + (B_1 - B_2)^2} \right] \quad (5.27)$$

5.2.2 碰撞的机理模型和结果

一般来讲，两粒子在碰撞过程中首先要相互作用，再交换位置，好像它们彼此相互“穿过”一样。于是，两个粒子碰撞时在时空中会出现一相移。在一维系统中，这个过程往往是从相反方向传来的两个微观粒子(孤子)的头部碰撞或在同一方向传播过程中具有速度大的粒子追赶速度小的粒子的过程(如图5.3所示)。但由于粒子的性质不一样，在相互作用后碰撞的粒子的相移大小和相互作用的范围是不相同的。一般来讲，它们是两个碰撞粒子的相对振幅比的函数。此时，常把粒子相互重叠的区域定义为相互作用长度，用 D 表示。

D. W. AOssey 等人用程序演算法数值计算了上述两个微观粒子(孤子)的碰撞过程。其结果示于图5.4中。其中图5.4(a)是碰撞过程的模型，图5.4(b)是它们的轨迹的变化。现主要关注两个粒子在碰撞点发生的相移。这种相互作用长度示于图中，它明显依赖于两个碰撞粒子的相对振幅。根据这种碰撞特征，Aossey 等人提出了一个数据模拟的物理模型。在这个模型中，式(3.155)在 $b < 0$ 时产生的 **sech** 型粒子用一个振幅为 A_i ，宽度为 W_i 的一个矩形脉冲来表示。其中 i 表示第 i 个粒子。两个相互碰撞的粒子随时间的演化示于图5.5中，这里示出了振幅不等的两个粒子的碰撞作用。在开始时，小粒子处在前面，发生碰撞后便处于后面，即碰撞后速度大和振幅也大的粒子完全穿过了小粒子，跑到了前面。在实际碰撞的区域外，两粒子无重叠。则可认为在碰撞后这两个粒子分开一段距离 $D = D_1 + D_2$ ，从而产生了相移，它们的轨迹在图5.5中加以描述。这种模拟图像体现了实验与数值计算的结果。而两个粒子的最小间距可认为是它们的半宽度。于是有 $D \geq \frac{W_1}{2} + \frac{W_2}{2}$ ，且 $D_1 \geq \frac{W_1}{2}$ ， $D_2 \geq \frac{W_2}{2}$ 。由于粒子的振幅与宽度有关，对 $b < 0$ 的非线性 **Schrödinger** 方程式(3.155)的暗粒子解式(5.26) $\left(W \approx \frac{1}{k} \right)$ ，则有 $B_i W_i = \text{constant} = K_1$ 。使用这些关系式，可求出两个粒子在碰撞后相移的比率为

$$\frac{D_1}{D_2} = \frac{B_1}{B_2} \tag{5.28}$$

而 D_1/D_2 随 B_1/B_2 变化的函数关系的理论与数值及实验值示于图 5.6 中，其中实线为理论值。从图 5.6(a)中可以看到，实验与理论值基本吻合。

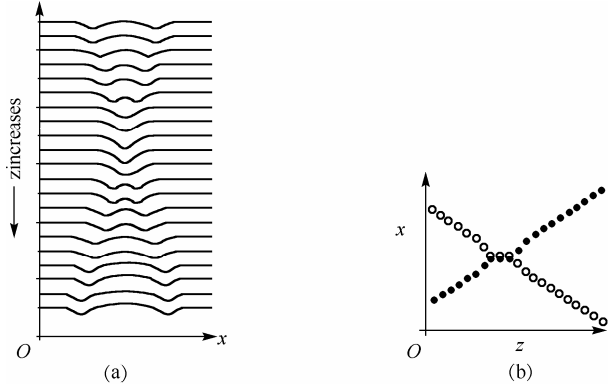


图 5.4 数字计算两个粒子的碰撞过程：(a)表示在 z 轴方向相等时间间隔产生的波的顺序；(b)为孤波信号的位移-时间关系

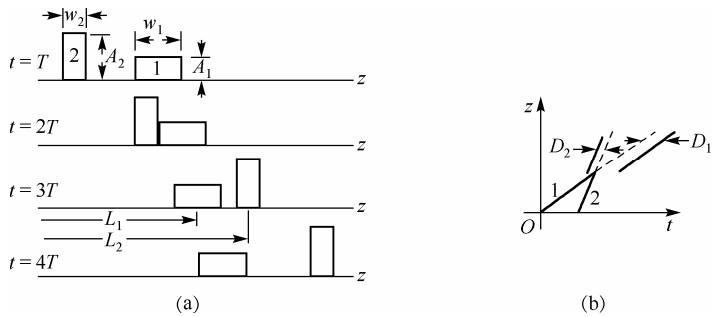


图 5.5 微观粒子的碰撞过程的模拟图：(a)粒子碰撞的模型；(b)信号位移-时间的关系

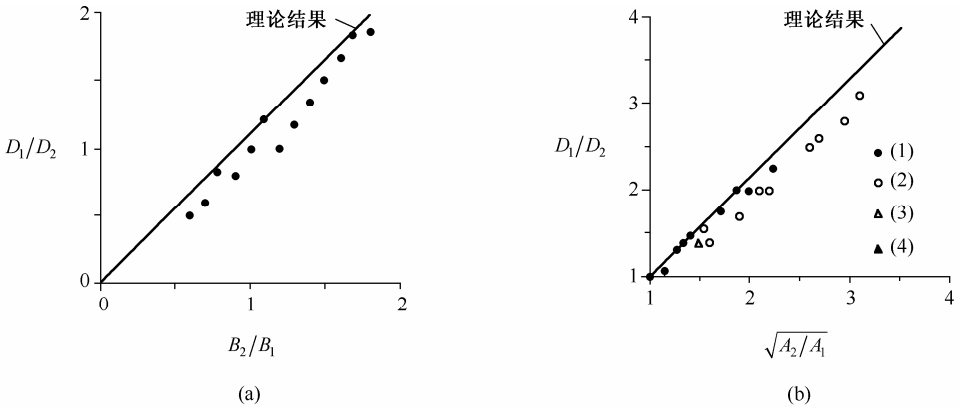


图 5.6 相移的比率与振幅的比率的关系: (a) 为由式 (5.28) 得出的理论结果, “•” 为数值模拟的结果。(b) 为 KdV 孤子的结果, 其中 (1) 表示实验结果; (2) 是 Zabusky 的结果; (3) 是 Lamb 的结果; (4) 是 Ikezi 等人的结果, 实直线表示由式 (5.30) 得到的结果

利用此模型也可估计出碰撞区域的大小或持续时间。对于以速度 v_i 运动的两个粒子, 在相互碰撞时持续的 ΔT 时间后, 交换了它们的位置。在这段时间内, 它们传播的距离分别可表示为 $L_1 = v_1 \Delta T$, $L_2 = v_2 \Delta T$ 。则相互作用的长度必须满足关系 $L = L_1 - L_2 = (v_1 - v_2) \Delta T \geq W_1 + W_2$ 。利用粒子的孤子态的振幅和以上关系 Aosey 等人得到

$$L \geq K_1 \left[\frac{1}{B_1} + \frac{1}{B_2} \right] \quad (5.29)$$

图 5.7 示出了所测得的相互作用长度随碰撞粒子的振幅改变的情况。其中虚线是式 (5.29) 中 $K_1 = 6$, $B_2 = 1$ 的结果, 而实线是两粒子相互作用时间的计算值, 它是从两个粒子宽度之和减去由于彼此排斥而产生的相移后, 再用粒子的横向速度 1 除后得到的值。由于纵向速度是常数, 则它可作为两个粒子相互作用的长度。从图 5.7 中可知以上结果与实验值完全一致, 说明所使用的模型是正确的, 同时也显示了由式 (3.2) 描述的微观粒子的经典粒子特性。

为了证实以上模拟的正确性, Aosey 等人又用类似的思路模拟了由 KdV 方程: $u_t + uu_x + cu_{xxx} = 0$ 得出的两个孤子 [可写成 $u(x, t) = A_i \text{sech}^2 \xi$] 的碰撞特性, 其碰撞的模型仍为图 5.5。他们求得了两个 KdV 孤子的碰撞过程应满足

$$A_j(W_j)^2 = \text{constant} = K_2 \quad \text{和} \quad \frac{D_1}{D_2} = \frac{W_1/2}{W_2/2} = \sqrt{\frac{A_2}{A_1}} \quad (5.30)$$

式中, A_j 和 W_j 分别为第 j 个 KdV 孤子的振幅和宽度。按照上面所述由非线性 Schrödinger 方程表示的粒子的碰撞方法, 他们求出了这类孤子的相互作用长度满足

$$L \geq K_2 \left(\frac{1}{\sqrt{A_1}} + \frac{1}{\sqrt{A_2}} \right) = \frac{K_2}{\sqrt{A_1}} \left(1 + \sqrt{\frac{A_1}{A_2}} \right) \quad (5.31)$$

Aossey 等人求出了两个 KdV 孤子相互碰撞后的相移比值随振幅比值的变化关系, 并将它和 Ikezi 等人的实验结果, Zabusky 和 Kruskal 及 Lamb 等人的数值计算结果相比较, 其结果一起示于图 5.6 中。其中的实线相应于式 (5.30) 的结果。Aossey 等人的模拟相互作用长度与两个碰撞 KdV 孤子的振幅比值的函数关系示于图 5.7 中, 在 $K_2=1$ 和 $A_1=1$ 时的结果在图中用虚线表示。在图中也同时示出了 Ikezi 等人的 KdV 波实验结果和 Zabusky 和 Kruskal 等人的数值计算结果。从图 5.6 和图 5.7 可知, Aossey 等人采用的宏观粒子碰撞模型(如图 5.5 所示)得到的结果与实验结果和数值的模拟结果十分接近。这种一致性不但支持了 Aossey 等人对于非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的微观粒子碰撞理论的正确性, 同时也有力地肯定了在非线性量子力学中的微观粒子确实具有经典碰撞的规律, 并具有明显的粒子特性。

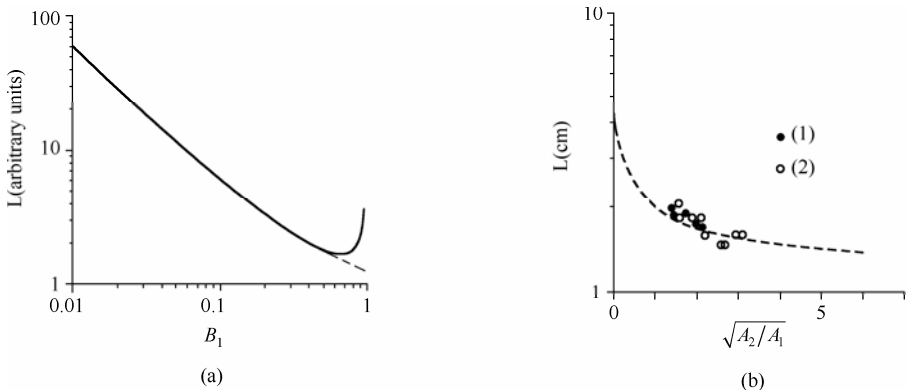


图 5.7 两粒子的孤子态碰撞时的相互作用长度与振幅的关系。(a) 为非线性 Schrödinger 方程的粒子的关系, 而虚线为 $B_2=1$ 和 $K_1=6$ 时式 (5.29) 的结果。(b) 为 KdV 孤子的相应关系。这里的 (1) 表示 Ikezi 等人的实验结果, (2) 表示 Zabusky 和 Kruskal 的数值模拟结果, 虚线为 $K_2=A_1=1$ 时式 (5.31) 的理论结果

P. K. Wai 等人研究了非线性 Schrödinger 方程: $i\phi_t + \phi_{xx} + 2|\phi|^2\phi = i\varepsilon_1\phi_{xxx} + i\varepsilon_2|\phi|^2\phi_x + i\varepsilon_3\phi^2\phi_x^*$ 的两个孤子的碰撞效应。这里实参数 ε_1 , ε_2 和 ε_3 分别为第三阶线性和非线性相互作用系数。此方程表示了在高阶色散存在时的微观粒子的运动特性。当 $\varepsilon_1=\varepsilon_2=\varepsilon_3=0$ 时, 他们得到此方程的解可表示为

$$\phi_{\text{sol}}(x', t') = 2\eta \exp \left[-\frac{1}{2} i v x' - i \left(4\eta^2 - \frac{1}{4} v^2 \right) t' \right] \text{sech}[2\eta(x' + vt')]$$

式中, η 是孤子的振幅; v 是正比于孤子的运动速度与平均群速度的偏差。此时该方程的两个孤子的碰撞是一种弹性碰撞。当 $\varepsilon_j \neq 0$ 时也有孤子解, 但两个孤子的碰撞是非弹性的。他们求得在两个孤子态的相对速度大于它们的振幅, 即 $|v_1 - v_2| \gg \eta_1, \eta_2$ 时的碰撞可以发生。在碰撞时, 在最低级近似下, 整个波形可以认为是两个碰撞孤子的“线性”叠加。

5.3 多粒子的碰撞效应及其稳定性

在前几节中, 仅研究了两粒子的碰撞特征, 它类似于经典粒子的弹性碰撞, 其主要特征是碰撞后仅有相位和位置的移动, 其总的相位移动等于各个粒子的相移的总和。在这种可积的碰撞模型中缺乏多孤子效应。但是, 在非可积模型中多粒子碰撞的特征又是什么呢? 可以想象在可积和非可积模型之间的主要差别是在多粒子碰撞时会产生能量或粒子的辐射。Frauenkron 等人在一个简单的可积方案基础上建立起来一个扩展的模拟法, 并用它来研究了多粒子的碰撞特征。发现此时出现一些非平庸效应, 但无能量辐射出现。这些非平庸效应是由于在碰撞的粒子之间能量交换和粒子的孤子态中出现的内部激发模引起的。这就是非可积模型中多粒子碰撞效应不同于可积模型的地方。

为了理解在多微观粒子碰撞的多粒子激发效应, Frauenkron 等人研究了由于多粒子相互作用所产生的一个小系数的五次方非线性相互作用的微扰非线性 Schrödinger 方程:

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t'} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + 2|\phi|^2 \phi = \varepsilon |\phi|^4 \phi \quad (5.32)$$

式中, ε 是一个小的非线性微扰作用系数。此方程也可以用来描述在具有强度依赖性的光折射系数 $n_{\text{nl}}(I = |\phi|^2)$ 的光波导中光的电场分量的传播特性。在 $\varepsilon = 0$ 时, 它就是式(3.155), 具有一个孤子解式(3.156)。现设它的振幅为 A_0 , 速度为 v 。此系统有三个可积常数, 分别为粒子数 N 、动量 P 和能量 E 。现将它们简单表示为

$$N_S = 2A_0, \quad P_S = vA_0, \quad E_S = \frac{1}{2} A_0 v^2 - \frac{2}{3} A_0^3 \quad (5.33)$$

实质上, 此时系统式(5.32)有无穷多个可积量, 但只有上述三个量是守恒的。

Frauenkron 等人使用了四阶 symplectic 可积方法研究了由式(5.32)描述的多粒子的碰撞特征。这个 symplectic 数值算法比传统的数值模拟法更好。在求解其中

的积分量时，其模的守恒量的精确度可达 10^{-11} ，而能量的守恒量的精度可达 10^{-6} 。

他们使用了大小为 $\mathbf{dx}' = 0.1$ 的格子，其空间的总长为 $L = [-800, 800]$ ，而时间步长为 $\mathbf{dt}' = 0.005$ 。他们用此方法研究了三个微观粒子(孤子态)和两个微观粒子(孤子)的碰撞特征。在三粒子体系中，具有速度最大的快孤子被认为是式(5.32)的真正解，这可避免它的振幅的初始振荡。另外两个慢粒子可用非微扰的非线性 Schrödinger 方程的真正两孤子解来模拟，以避免由于强的初始状态的叠加所产生的辐射。这些微观粒子分别放置在位置为 $x_j^{i(0)} = -650$ 和 $\pm x_{s1}^{i(0)} = \pm 45$ 处，其初始振幅 $A_j = 1/\sqrt{2}$ ， $A_{s1} = 0.35$ ，而速度为 $v_j = 3.0$ 和 $v_{s1} = \pm 0.2$ ，这些数值是在两个慢粒子发生重大叠加时与第三个快粒子产生碰撞的条件下得出的，其结果如图 5.8 所示。

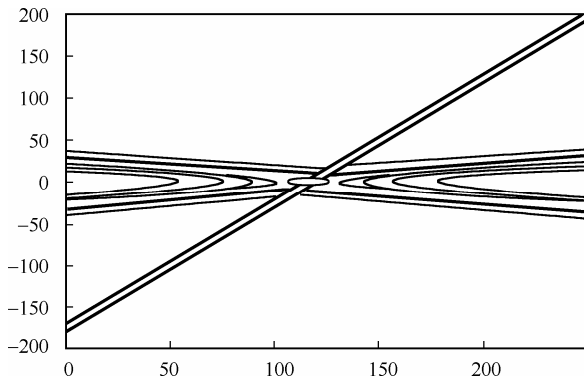


图 5.8 在非线性量子力学中的三个粒子的碰撞特性。具有振幅为 A 和速度为 V_j 的粒子与两个相等振幅 A_{s1} 和速度为 $\pm v_{s1}$ 的慢粒子的碰撞。在碰撞的瞬间，三个粒子发生了重大的重迭效应

Frauenkron 等人也研究了两个粒子发生非弹性碰撞的情况，其模拟的初始条件与前面的相同，但现在仅存在一个以相反方向运动的慢粒子。在 $\varepsilon < 0.1$ 的情况下，碰撞后微观粒子的速度变化很小，以至于几乎无法度量出它们的差别。在这种非弹性碰撞中存在能量的辐射。对于具有相等振幅 $A_1 = A_2 = A$ 和速度 $v_{1,2} = \pm v(\sqrt{A})$ 的对称性的两个微观粒子的相碰中，其辐射的能量 E_{rad} 可用解析方法求出，它为 $E_{\text{rad}} = c'\varepsilon^2 A^7 [1 + F(v/A)]$ ，这里 c' 是常数， $F(v/A)$ 是一个修正项，并且是 v/A 的函数。用类似的方法他们也求出了粒子数的辐射-感应变化量为

$$N_{\text{rad}} = (4/v^2) E_{\text{rad}}$$

由于对称性，两个粒子的总动量在辐射存在的情况下仍可保持不变。由于粒子数和总能量具有守恒的特性，则可以得到 $N_s = N'_s + N_{\text{rad}}$ ， $E_s = E'_s + E_{\text{rad}}$ ，这里的 N'_s 和 E'_s 分别由式(5.33)给出。在此两式中的左边属于碰撞前的值，而右边是碰撞后存

在有辐射时的值。从这两个平衡方程可求出微观粒子在碰撞后的振幅变化 ΔA_0 和速度变化 Δv ，它们分别可表示为 $\Delta A_0 = \frac{1}{v^2} E_{\text{rad}}$ 和 $\Delta v = \frac{2A_0}{v^3} E_{\text{rad}}$ 。它们分别表示了微观粒子在碰撞后其特性的变化是正比于 ε^2 ，而反比于 v^2 。对于在具有大速度 v 的两个粒子的非弹性碰撞中，由于相互作用的时间太短，其微观粒子的特征参数变化很小。对于两个性质不同的粒子碰撞，由于重迭时间太小，其改变也小。

不同于两粒子碰撞，在三粒子碰撞中 **Frauenkron** 等人在 ε 的一阶效应中得到了非平庸的结果。图5.9中示出了在碰撞后在不同微扰参数 ε 值时粒子速度的变化。在 ε 的一阶时，变化是线性的。在碰撞后，粒子的振幅出现了小的振荡。对于大的 ε 值，这种振荡效应更加突出。这时三粒子碰撞不同于两粒子碰撞的特征。同时，他们计算的结果也示出了在 ε 的一阶近似时也会出现能量的交换。

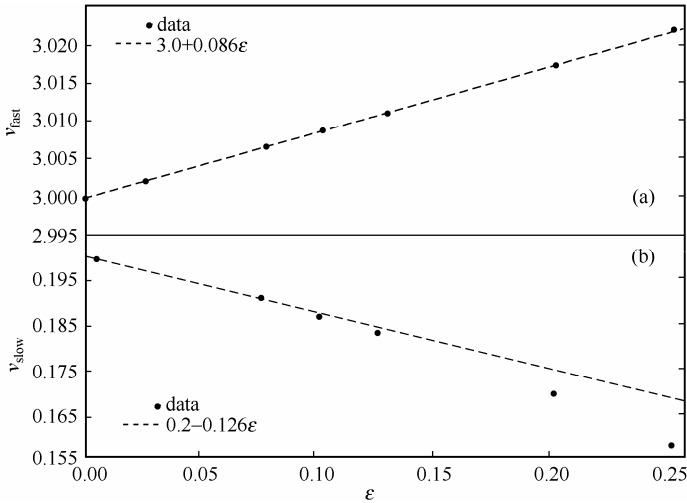


图 5.9 对于不同 ε 值的三个微观粒子在相碰后的速度变化。(a) 是 $v_j = 3.0$ 的快粒子的情况；(b) 是 $v_{s1} = 0.2$ 的两个慢粒子的变化，其中的断开矩形和圆圈表示了数值的结果，虚线显示出了其结果适合于线性函数

为了找出这种碰撞的规律，**Frauenkron** 等人研究了具有振幅 A_j 和速度 v_j 的快粒子与具有相同振幅 A_{s1} 和相反速度 $\pm v_{s1}$ 的一对慢粒子的碰撞特征。在 $v_j \neq v_{s1} \neq A_{s1}$ 的条件下，他们用 $\phi = \phi_j(v_j) + \phi_{s1}(v_{s1}) + \phi_{s1}(-v_{s1})$ 来表示三粒子解，并用具有单孤子解的 **Jost** 函数的反散射方法的微扰理论计算了三粒子碰撞后的物理参数的变化。对于两个慢粒子的初始振幅相等的条件下，在三粒子碰撞后，其微观粒子的物理参数的改变为

$$v'_j = v_j + \Delta v_j \quad \text{和} \quad \pm v'_{s1} = \pm v_{s1} \mp \Delta v_{s1} \quad (5.34)$$

$$\text{式中,} \quad \Delta v_j = -192\varepsilon \frac{v_{s1} A_{s1}^4}{v_j^2} G(\delta), \quad \Delta v_{s1} = 96\varepsilon \frac{A_j A_{s1}^3}{v_j} G(\delta) \quad (5.35)$$

此处, $\delta = A_{s1} (x'_{s12} - x'_{s11})$ 表示了在碰撞期间慢粒子与快粒子之间的间距:

$$G(\delta) = \frac{1}{\sinh^2 \delta} \left[\frac{3(\delta - \tanh \delta)}{\tanh^2 \delta} - \delta \right] \quad (5.36)$$

是与微扰参数具有相同的大小, 并在 $\delta \rightarrow 0$ 和 $\delta \rightarrow \infty$ 时趋于 0。由于微观粒子的振幅在碰撞后无变化, 则有 $\Delta N = \sum_i \Delta A_i = 0$ 。再因对称性的缘故, 其总动量也不改变。但能量刚好相反, 发生了 $\Delta E = (2A_{s1} v_{s1} \Delta v_{s1} + A_j v_j \Delta v_j)$ 的变化。若使用式 (5.35), 可以得到 $\Delta E = 0$ 。这意味着由式 (5.35) 给出的结果恰好能表示相应的能量守恒定律。

为了求出在碰撞的粒子之间产生的能量交换值与粒子间间距的关系, Frauenkron 等人固定了微扰值为 $\varepsilon = 0.01$ 。在仅考虑改变两个慢粒子之间初始间距的条件下, 所得到的结果发现两个慢粒子在碰撞时刻的间距 δ 发生了改变。同时, 他们还测量了在无第三个粒子存在时两个慢粒子之间的碰撞情况。此时, 在快粒子处在 $x' = 0$ 点时, 他们测得了两个慢粒子的初始间距为 x'_D , 其相应的末速度可用线性回归分析法得到。数值计算的结果显示在图 5.10 中, 其中粒子速度的相对变化 Δv_j 和 Δv_{s1} 与 x'_D 的关系也在同一图中示出。显然, 速度的这种变化是由于粒子在碰撞期间出现的能量交换引起的。实验还发现这种效应强烈依赖于在碰撞瞬间两粒子之间的间距。如果它们之间的间距很大, 则无能量交换发生。同时, 当两个慢粒子的质心相近, 并重合时, 也无能量交换。

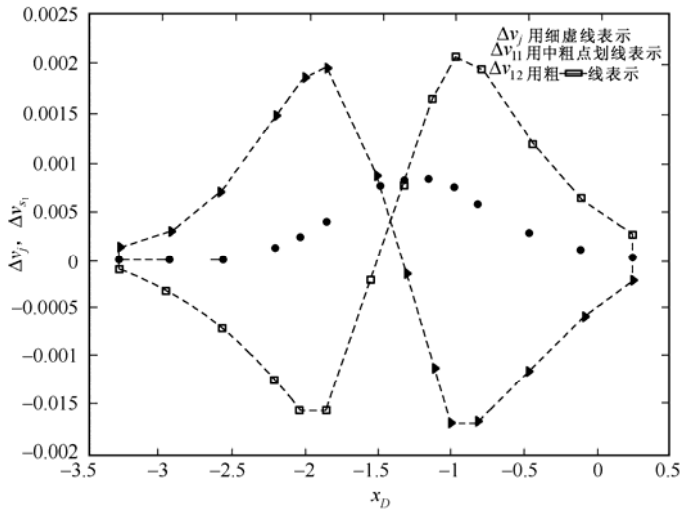


图 5.10 微观粒子的速度变化与在慢粒子之间的外推初始距离 x_D 之间的关系。其点线表示了快粒子的速度变化 Δv_j ，破折点线表示了慢粒子的速度变化 Δv_{s1} ，符号 $\Delta\Delta$ 表示了从 $\varepsilon = 0.01$ 时由数值模拟得到的数值

更详细地分析表明在三粒子碰撞时这些能量交换是非常复杂的，其中快粒子还会出现内部模的激发。这种内部模相关于微观粒子的线性非平庸局域模的本征振动。在 $\varepsilon > 0$ 时它们始终存在，并表征了微观粒子振幅的长寿命振荡特性。因此，在其中出现的粒子的内部模在三粒子碰撞时的能量交换中扮演了重要角色。因此，不同于二粒子的非弹性碰撞，在三粒子的非弹性碰撞中，出现了粒子之间的无辐射的能量交换和碰撞粒子的内部模的激发。这些特征既表征了微观粒子的粒子性，也显示了所具有的波动性。这两个效应导致了碰撞粒子的速度改变，其变化的大小与微扰振幅 ε 同一个数量级。这些效应强烈地依赖于碰撞粒子之间的间距。当这个间距很大或粒子质心重合时，此效应趋于零。

5.4 量子化的微观粒子的碰撞特性

在前几节中仅研究了由经典非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 描述的微观粒子的碰撞特征。但微观粒子本身是量子化的，则由量子化非线性 Schrödinger 方程描述的微观量子的碰撞又具有何种特征呢？这是值得研究的。

由第 3 章的研究得知，在二次量子化表象中量子化的非线性 Schrödinger 方程本质上描述了具有 δ -相互作用势的一维 Boson 粒子演变的动力学特性。后者可用 Bethe 表示法求解。此法首先运用于求解一个孤立的海森堡自旋链，后来又应用于量子场论中。

另外,反散射方法也可用于求解量子化非线性 Schrödinger 方程的解。因此,两种方法都可应用于构造非线性量子哈密顿量的本征态。量子反散射方法可构成这些本征态的产生算符,进而可推出算符的对易关系。而 Bethe 表示法通过求解波动方程也可求出这些关系。当量子化非线性 Schrödinger 方程的非线性项的系数为正时,存在一个束缚态的孤子解,这个具有束缚性质的波函数恰好是哈密顿算符的本征态。Wadati 和 Sakagami 用基础束缚态的叠加构成一个非线性“波包”去逼近具有零速度的经典基础孤子解,从而显现出了场算符的基本特征。他们推广了这一结果,并应用 Galilean 变换给出了孤子解。虽然他们的结果提供了非线性 Schrödinger 方程量子化的基础,但他们的方法仍存在很多未解决的问题。例如,由于一个孤子态应当是束缚态的叠加,并是与时间无关的,则它是否就一定是给定方程的解,这是值得商榷的。其次,场算符的期待值应相应于经典孤子场,而不应是场算符的矩阵元素。当这种方法推广到高阶孤子态时也应当给出有关孤子之间的碰撞特性。至此,Lai, Haus 和 Wright 等人重新构造了一个孤子态,用以研究孤子传播的量子效应和量子孤子的碰撞特征。如果使用与时间相关的 Hartree 近似可以得到量子化非线性 Schrödinger 方程的近似解。在这种方法中,此量子化方程等价于具有 δ -相互作用势的一维 Boson 系统的演化方程。使用这种方法既可构造一个近似基础解和高阶孤子解,而且还可得出在孤子传播过程出现的相移。现在,用此方法来处理量子微观粒子的碰撞。

如所知,在二次量子化表象中的量子化非线性 Schrödinger 方程可用式(3.47)来表示,这里 $\hat{\phi}(x',t')$ 和 $\hat{\phi}^+(x',t')$ 是在点 $x' = x\sqrt{2m}/\hbar$ 和时间 $t' = t/\hbar$ 的场消灭和产生算符,它们满足对易关系式(3.48)和式(3.49)。由于任何量子态在福克空间中都可使用式(3.50)~式(3.54)进行展开,则方程式(3.54)就能够用与时间相关的 Hartree 近似法求出其近似解。而 Hartree 近似的基础就是假设处于相互作用的每一个粒子都具有相同的相互作用势。于是便可以用单粒子的波函数去描述这个粒子系统。对此,Lai 和 Haus 等人用下面的表示式:

$$\int f_n^{(H)}(x'_1, \dots, x'_n, t') = \prod_{j=1}^n \Phi_n(x'_j, t') \quad (5.37)$$

求出 Hartree 波函数,这里的波函数 Φ_n 是用以下函数的极小化求得的:

$$I = \int f_n^{*(H)}(x'_1, \dots, x'_n, t') \left[i \frac{\partial}{\partial t'} + \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2}{\partial x_j'^2} - 2b \sum_{1 \leq i \leq j \leq n} \delta(x'_j - x'_i) \right] \cdot f_n^{(H)}(x'_1, \dots, x'_n, t') dx'_1, \dots, dx'_n = n \int \Phi_n^* \left[i \frac{\partial \Phi_n}{\partial t'} + \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x'^2} - (n-1)b \Phi_n^* \Phi_n \Phi_n \right] dx' \quad (5.38)$$

如果 Φ_n 满足含有由 $(n-1)$ 标志的非线性特性的以下经典非线性 Schrödinger 方程:

$$i \frac{\partial \Phi_n}{\partial t'} = - \frac{\partial^2 \Phi_n}{\partial x'^2} + 2(n-1)b\Phi_n^* \Phi_n \quad (5.39)$$

则可以求出式(5.38)的极小值。这是量子理论和经典理论相关联的一种具体表现。根据式(3.156)，方程式(5.39)具有以下基础孤子解：

$$\Phi_n(x', t') = \frac{2\sqrt{2}\eta}{\sqrt{|b(n-1)|}} e^{-4i(\xi^2 - \eta^2)t' - 2i\xi(x' - x'_0)} \text{sech}[2\eta(x' - x'_0 + 4\xi t')] \quad (5.40)$$

相反于经典解， η 不能是任意数，这是因为 Φ_n 必须满足归一化条件

$$\int |\Phi_n(x', t')|^2 dx' = 1 \quad (5.41)$$

$$\text{由此便可得出量子化条件为} \quad \eta = \frac{n-1}{4}|b| \approx \frac{n}{4}|b| \quad (5.42)$$

将式(5.42)代入式(5.40)，并设 $\xi = -p/2$ ，这里 p 扮演了动量的角色，则有

$$\Phi_{np} = \frac{1}{2}\sqrt{(n-1)|b|} e^{i(n-1)^2|b|^2 t'/4 - ip^2 t' + ip(x' - x'_0)} \times \text{sech}\left[\frac{1}{2}(n-1)|b|(x' - x'_0 - 2pt')\right] \quad (5.43)$$

利用式(5.43)，从式(5.37)可求出 Hartree 乘积本征态，它为

$$|n, p, t'\rangle_H = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left[\int \Phi_{np}(x', t') \hat{\phi}^+(x') dx' \right]^n |0\rangle \quad (5.44)$$

使用关于 n 的 Poisson 分布，则上述这些态的叠加便可得出基础孤子态为

$$|\phi_s\rangle_H = \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha_0|^2/2} |n, p, t'\rangle_H = \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha_0|^2/2} \left[\int \Phi_{np}(x', t') \hat{\phi}^+(x') dx' \right]^n |0\rangle \quad (5.45)$$

如果量子数很大，即 $n_0 = |\alpha_0|^2 \gg 1$ 时，则非线性系数不会很大，即 $|b| \ll 1$ 。若观察的时间又被限制在 $n_0 \sqrt{n_0} |b|^2 t \leq 1$ 的范围内，则在式(5.45)中的求和能够用一个指数来近似，则 $|\phi_s\rangle_H$ 可等价于一个相干态

$$\begin{aligned} |\phi_s\rangle_H &= \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-|\alpha_0|^2/2} \left[\int \Phi_{np}(x', t') \hat{\phi}^+(x') dx' \right]^n |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha_0|^2/2} \exp \left[\int \Phi_{n_0 p}(x', t') \hat{\phi}^+(x') dx' \right] |0\rangle \end{aligned} \quad (5.46)$$

如果用平均值 n_0 代替式(5.46)中的变量 n ，则可忽略 Φ_{np} 对 n 的依赖性，于是场量平均值可表示成

$${}_H \langle \phi_s | \hat{\phi}(x') | \phi_s \rangle_H \approx \alpha_0 \Phi_{n_0 p}(x', t') \approx \frac{n_0 - 1}{2} \sqrt{|b|} e^{i(n_0 - 1)^2 |b|^2 t'/4 - ip^2 t' + ip(x' - x'_0)}.$$

$$\operatorname{sech}\left[\frac{1}{2}(n_0-1)|b|(x'-x'_0-2pt')\right] \quad (5.47)$$

它恰好就是上述方程的经典解。

如果观察的时间足够长,则相位对 n 的依赖性不能忽略。其时上述平均场量变为

$$\begin{aligned} {}_H\langle\phi_s|\hat{\phi}(x')|\phi_s\rangle_H &= \sum_n e^{-|\alpha_0|^2} \cdot \frac{|\alpha_0|^{2n}}{n!} \cdot \frac{\alpha_0\sqrt{n}}{2} \sqrt{|b|} \cdot \\ &e^{in^2|b|^2t'/4-ip^2t'+ip(x'-x'_0)} \operatorname{sech}\left[\frac{n}{2}|b|(x'-x'_0-2pt')\right] \end{aligned} \quad (5.48)$$

式(5.48)示出的场的期待值就是粒子所满足的非线性 Schrödinger 方程式(3.62)的一组经典孤子态解的平均值。这表明当粒子场在非线性系统中传播时,其粒子动力学方程的解的简单叠加便是粒子场的期待值。由于在式(5.48)中不同 n 的成分具有不同的相速度,于是可预期在粒子的运动过程中,其微观粒子(孤子)会出现相位移。但在这一计算中使用的“动量” p 是单值的,而不是一个叠加值。则态 $|n, p, t'\rangle_H$ 不再是动量算符 p 的本征态。于是,动量的分布便相关于粒子的状态,则就必须使用动量的分布去构成一个孤子态。如所知,在经典情况下,非线性作用与色散效应的平衡导致了孤子的出现。在量子情况下,这两个效应的平均值是相互抵消的,但仍会出现一些高阶色散效应和高阶相位移效应。若用准几率密度方法可求出这两个效应的具体表示式。

现用 Hartree 法来求出两粒子态的碰撞特征。由于两粒子态(孤子)在碰撞时和其他时间的状态不同,则必须对它们做不同的处理。此时构成的孤子态不再是上面所说的基础孤子态。在碰撞过程中,碰撞的两个微观粒子(孤子)是处在一个相同的区间中,并有强的相互作用。但它们的行为是相同的,于是可用相同的波函数来表示。但在碰撞的前后,这个系统是由两个独立的粒子组成的。这两个粒子属于不同的组,又具有不同的特性。于是应当用不同的波函数来表示它们。但在同一组中相互作用的粒子是可以用一个相同的波函数来表示的。基于这种思想, Lai 和 Haus 构造了一个两孤子态,它由 n_1 和 n_2 量子的两种粒子构成。则在碰撞过程中,整个体系的波函数可表示成

$$f_{n_1 n_2}^{(c)}(x'_1, \dots, x'_{n_1}, x'_{n_1+n_2}, t') = \prod_{j=1}^{n_1+n_2} \phi_{n_1 n_2}(x'_j, t') \quad (5.49)$$

但在其他情况下,它应表示为

$$f_{n_1 n_2}^{(0)}(x'_1, \dots, x'_{n_1+n_2}, t') = \sum_{|Q|} \prod_{j=1}^{n_1} \Phi_{n_1}^{(1)}(x'_{Q(j)}, t') \prod_{j=n_1+1}^{n_1+n_2} \Phi_{n_2}^{(2)}(x'_{Q(j)}, t') \quad (5.50)$$

在后者中是关于对 Q 的求和, 表示了对 $[1, 2, \dots, n_1 + n_2]$ 的所有可能的排列求和。在这种排列中, 粒子进入 $[1, 2, \dots, n_1]$ 和 $[n_1 + 1, n_1 + 2, \dots, n_1 + n_2]$ 组合数的概率尽管不同, 但也不会改变上式求和的结果。这是因为 $f_{n_1 n_2}^{(0)}$ 是 x'_j 的对称函数的缘故。这里所有的 $\Phi_{n_1 n_2}$, $\Phi_{n_1}^{(1)}$ 和 $\Phi_{n_2}^{(2)}$ 函数都满足式 (5.41) 的归一化条件。在 $\Phi_{n_1 n_2}$ 与 $\Phi_{n_1}^{(1)}$ 和 $\Phi_{n_2}^{(2)}$ 之间的关系可通过它们的物理含义来建立。如前所述, $\Phi_{n_1 n_2}$ 表示了在碰撞状态时的两粒子态的“平均”波函数。在两个粒子未发生碰撞时, $\Phi_{n_1}^{(1)}$ 表示 n_1 粒子组的粒子波函数, 而 $\Phi_{n_2}^{(2)}$ 表示了 n_2 粒子组的粒子波函数。于是 $\Phi_{n_1 n_2}$ 可近似地表示为以下的渐近式:

$$\Phi_{n_1 n_2} \rightarrow \sqrt{\frac{n_1}{n_1 + n_2}} \Phi_{n_1}^{(1)} + \sqrt{\frac{n_2}{n_1 + n_2}} \Phi_{n_2}^{(2)} \quad (5.51)$$

利用式 (5.50), 并采用类似于线性量子力学中的 WKB 方法, 可建立起碰撞前后两粒子态之间的关系。若将式 (5.49) 代入式 (5.38), 并极小化这个泛函表示式, 则可得到

$$i \frac{\partial \Phi_{n_1, n_2}}{\partial t'} = - \frac{\partial^2 \Phi_{n_1, n_2}}{\partial x'^2} + 2(n_1 + n_2 - 1)b \left| \Phi_{n_1, n_2} \right|^2 \Phi_{n_1, n_2} \quad (5.52)$$

再将式 (5.50) 代入式 (5.38), 并极小化这个泛函, 可得到

$$i \frac{\partial \Phi_{n_1}^{(1)}}{\partial t'} = - \frac{\partial^2 \Phi_{n_1}^{(1)}}{\partial x'^2} + 2(n_1 - 1)b \left| \Phi_{n_1}^{(1)} \right|^2 \Phi_{n_1}^{(1)} \quad (5.53)$$

$$i \frac{\partial \Phi_{n_2}^{(2)}}{\partial t'} = - \frac{\partial^2 \Phi_{n_2}^{(2)}}{\partial x'^2} + 2(n_2 - 1)b \left| \Phi_{n_2}^{(2)} \right|^2 \Phi_{n_2}^{(2)} \quad (5.54)$$

如果将式 (5.51) 代入式 (5.52), 由于 $\Phi_{n_1}^{(1)}$ 和 $\Phi_{n_2}^{(2)}$ 是独立的, 则式 (5.53) ~ 式 (5.54) 也能得到。这表明式 (5.51) 是满足 Hartree 近似法的要求。此时式 (5.53) ~ 式 (5.54) 与式 (5.39) 相同。这就清楚地表明非碰撞的两粒子态是两个基础孤子态的乘积。于是式 (5.53) 和式 (5.54) 的解很容易求出, 如下式所示:

$$\Phi_{n_j}^{(j)} = \sqrt{\frac{1}{2(n_j - 1)}} |b| e^{i(n_j - 1)^2 |b|^2 t' / 4 - i p_j^2 t' + i p_j (x' - x'_j) + i \theta_j} \times \\ \operatorname{sech} \left[\frac{n_j - 1}{2} |b| (x' - x'_{j0} - 2 p_j t') \right] \quad j = 1, 2 \quad (5.55)$$

但是, 此时这两粒子态在碰撞前后的相位和平均位置是不同的, 其相差值可通过碰撞前后的状态表示式的差别中得出。如上所述, 在碰撞前后的

$$\sqrt{\frac{n_1}{n_1+n_2}}\Phi_{n_1}^{(1)} + \sqrt{\frac{n_2}{n_1+n_2}}\Phi_{n_2}^{(2)}$$

是相同于 $\Phi_{n_1 n_2}$ 的渐进近似表示式, 或者说是经典非线性 Schrödinger 方程式 (5.52) 的渐近解。这表明经典非线性 Schrödinger 方程有两孤子解。而碰撞前, 这个两孤子解类似于两个基础孤子。碰撞后, 其解的形式是相同的, 但相位和位置发生了改变。根据 Zakharov 和 Shabat 的理论, 两个粒子的相位和位置发生移动。对于其中一个粒子来讲, 它们的变化可分别表示为

$$\begin{aligned} \delta\theta_1(n_1, p_1, n_2, p_2) &= -2 \arg \left(\frac{\zeta_1 - \zeta_2}{\zeta_1 - \zeta_2^*} \right) \\ &\approx -2 \left\{ \arctan \left[\frac{|b|(n_1 + n_2)}{2(p_2 - p_1)} \right] - \arctan \left[\frac{|b|(n_2 - n_1)}{2(p_2 - p_1)} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.56)$$

$$\begin{aligned} \delta x_1'(n_1, p_1, n_2, p_2) &= \frac{1}{\eta_1} \ln \left(\frac{\zeta_1 - \zeta_2}{\zeta_1 - \zeta_2^*} \right) \approx \frac{2}{n_1 |b|} \left\{ \ln \left[(p_2 - p_1)^2 + \frac{|b|^2}{4} (n_2 - n_1)^2 \right] - \right. \\ &\quad \left. \ln \left[(p_2 - p_1)^2 + \frac{|b|^2}{4} (n_2 + n_1)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.57)$$

式中, $\zeta_1 = \xi_1 + i\eta_1$; $\zeta_2 = \xi_2 + i\eta_2$ 。对于第二个微观粒子也有类似的表示式。

因此, 量子化的微观粒子在碰撞前后的状态变化特性仍与经典微观粒子的碰撞相同。这种特性也在量子微观粒子的碰撞过程中出现的量子涨落效应中出现。这里的 $\delta\theta_i$ 和 $\delta x_i'$ ($i=1,2$) 是 n_j ($j=1,2$) 的函数。在上述计算中, 在构建粒子数算符的近似本征态时也使用了含时的 Hartree 近似, 但没有使用动量和哈密顿算符的真正本征态。在粒子传播过程中, 所得到的孤子解会经历一个相位的移动, 但是, Hartree 近似抑制了动量的不确定性。则动量的分布必然相关于具有一个质心位置的孤子, 这像粒子数的不确定性必然导致粒子自身的相位移动一样。Lai 和 Haus 使用了 Bethe 表示式和以下本征态

$$|\phi\rangle = \sum_n \alpha_n \int g_n |n, p, t'\rangle dp, \quad \alpha_n = \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{|\alpha_0|^2}{2}} \quad (5.58)$$

$$\text{此时, } g_n(p) = \frac{1}{(\Delta p)^{1/2} (\bar{n})^{1/4}} \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{|p - p_0|^2}{(\Delta p)^2} - i n p x_0' \right] = g(p) e^{-i n p x_0'}, \sum_n |\alpha_n|^2 = 1 \text{ 构建}$$

了该系统的哈密顿量的真正本征态和一个孤子态。于是基础孤子态和高阶孤子态也

能相应重建。使用平均场方法可证明这种构建是合理的。通过在其中取大粒子数的极限值,则仍能得到经典结果。在这当中,由于动量的不确定性,这孤子在传播过程中会色散。但是,当这个孤子所包含的基础孤子数大于 1 时,这种色散效应是很小的。当它们碰撞时,由于碰撞的影响,所引起的微观粒子的质心相位和位置的变化,对于第一个微观粒子(孤子)来讲,可表示成

$$\delta\theta_1 = \theta(n_{10} + 1, p_{10}, n_{20}, p_{20}) - \theta(n_{10}, p_{10}, n_{20}, p_{20})$$

$$\delta x_1' \approx \frac{1}{n_{10}} \frac{\partial \theta(n_{10}, p_{10}, n_{20}, p_{20})}{\partial p_1} \quad (5.59)$$

对于第二个微观粒子(孤子)来讲,可表示成

$$\delta\theta_2 = \theta(n_{10}, p_{10}, n_{20} + 1, p_{20}) - \theta(n_{10}, p_{10}, n_{20}, p_{20})$$

$$\delta x_2' \approx \frac{1}{n_{20}} \frac{\partial \theta(n_{10}, p_{10}, n_{20}, p_{20})}{\partial p_2} \quad (5.60)$$

在这些式中所有物理量的下标中的“O”都表示了其质心的值。因此,在非线性量子力学中,微观粒子的量子碰撞特征基本上相同于由经典非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的碰撞规律。从而也表明了量子化微观粒子也具有粒子的特性。

5.5 杂质对微观粒子的散射效应

如我们所知,当一列波遇到障碍物时将要发生散射。因此散射是波的一种特征。在非线性量子力学中由于微观粒子具有波动性,在遇到杂质时也会产生散射。研究这种散射的特点反过来也可以说是微观粒子所具有的波动性。本节关注微观粒子与无序介质中杂质的散射特点。众所周知,在线性量子力学中,这种无序会产生 Anderson 局域,这意味着平面波的传输系数随系统的尺度变化而指数衰减。于是除反射和散射外,还会出现内部模和杂质模的激发。此性质也依赖于杂质性质和微观粒子的速度。这里将采用 Kivshar 等人, Malomed, Zhang 和 Fei 等人的方法来研究不同类型杂质对非线性微观粒子的散射特性。

在非线性量子力学系统中,由于杂质的存在而出现一作用势,致使微观粒子的动力学方程应写成

$$i\phi_t + \phi_{xx'} + 2|\phi|^2 \phi = \varepsilon f(x')\phi \quad (5.61)$$

这里 ε 是一个小实参数, $f(x')$ 表示了由杂质所引起的局域势,具有 $f(x' \rightarrow \infty) = 0$ 的特点。显然在 $\varepsilon = 0$ 时,式(5.61)就是式(3.155),其解是振幅为 2η ,波速为 $+4\xi$ 的钟型

孤子波式(3.95)，其质量密度为 $N = 4\eta$ ，束缚能为 $E_b = 4\eta^2$ 。这里用 Born 近似法来确定微观粒子被杂质散射时的状态和特征。现假设在 $|\varepsilon|\eta \ll \xi^2$ 的条件下，微观粒子在散射后其速度不会改变。按照 Zakharov 等人的反散射方法，被杂质散射后的微观粒子的粒子谱密度 $n(\lambda)$ 可以表示成 $n(\lambda) \approx \pi^{-1} |b(\lambda)|^2$ ，这里 $|b(\lambda)|^2 \ll 1$ ，而 $b(\lambda)$ 就是在反散射方法中使用过的式(3.87)中的 Jost 系数 $b(\lambda)$ ， λ 是有关的实谱参量，它决定于发射的线性波的波数 $k(\lambda) = 2\lambda$ 和频率 $\omega(\lambda) = k^2 = 4\lambda^2$ 。而 Jost 系数 $b(\lambda)$ 在上述微扰下的演变用 Karpman 方法可表示成

$$\frac{\partial b(\lambda, t')}{\partial t'} = 4i\lambda^2 b(\lambda, t') + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} f(x') [\phi(x', t') \Psi_1'(x', t', \lambda) \psi_2^*(x', t', \lambda) - \phi^*(x', t') \Psi_2^*(x', t', \lambda) \psi_1(x', t', \lambda)] dx' \quad (5.62)$$

这里 $\Psi_{1,2}(x', t', \lambda)$ 和 $\psi_{1,2}(x', t', \lambda)$ 是 Jost 函数的分量，对于式(3.95)的单孤子解，这些函数的具体形式是由 Karpman 得到的， $\phi(x', t')$ 满足式(5.61)。

按照 Kivshar 等人的方法，在散射前即在 $t' \rightarrow -\infty$ 时，这个微观粒子是处于由式(3.95)表示的孤子局域态中。这意味着对于式(5.62)的初始条件是 $b(\lambda, t' \rightarrow -\infty) = 0$ 。

在这个散射过程中由微观粒子发射的子波的整个粒子谱密度 $n_{\text{rad}}(\lambda)$ 能表示成

$$n_{\text{rad}}(\lambda) = \frac{1}{\pi} |b(\lambda, t' = +\infty)|^2 = \varepsilon^2 \tilde{n}_{\text{rad}}^{(1)}(\lambda) \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{+\infty} f(x_1) f(x') e^{i\beta(\lambda)(x_1 - x')} dx' \quad (5.63)$$

$$\text{式中, } \tilde{n}_{\text{rad}}^{(1)}(\lambda) = \frac{\pi}{2^8 \xi^4} \beta^2(\lambda) \text{sech}^2 \left[\frac{\pi(\lambda^2 - \xi^2 + \eta^2)}{4\eta\xi} \right], \quad \beta(\lambda) = \frac{(\lambda - \xi^2) + \eta^2}{\xi} \quad (5.64)$$

在此过程中微观粒子被杂质反射后朝后方传播的粒子数可表示成

$$N_r = \int_{-\infty}^{+\infty} n_{\text{rad}}(\lambda) d\lambda$$

则反射系数 R 就是上述量 N_r 与总的粒子数 $N = 4\eta$ 的比值，即为

$$R = \frac{1}{4\eta} \int_0^{+\infty} n_{\text{rad}}(-\lambda) d\lambda \quad (5.65)$$

对于一个孤立的点杂质来讲，其杂质势 $f(x')$ 是一个 δ 函数，则发射的粒子谱密度从式(5.63)可得到为 $n_{\text{rad}} = \varepsilon^2 \tilde{n}_{\text{rad}}^{(1)}(\lambda)$ ，于是反射系数为

$$R^{(1)} = \frac{\pi \varepsilon^2}{2^{10} \alpha \xi^2} \int_0^{+\infty} \frac{(x' + 1)^2 + \alpha^2}{\cosh^2 \left[\pi(x'^2 + \alpha^2 - 1)/4\alpha \right]} dx' \quad (5.66)$$

这里 $\alpha = \eta/\xi$ 。当 $\alpha = 0$ 时, $R^{(1)}$ 退化为线性波动的值, 即 $R_0^{(1)} \approx \varepsilon^2/4\nu_0^2 = \varepsilon^2/16\xi^2$ 。对于小的 α 值, 则 $R^{(1)}(\alpha)/R_0^{(1)}$ 开始增加到 1.004 (此时 $\alpha = \alpha_c \approx 0.178$), 以后又迅速减少到零。因此, 对于 $\alpha \ll 1$ 的反射系数接近于零, 于是它表示成

$$R^{(1)} \approx \frac{\pi\alpha^{7/2}}{16\sqrt{2}} R_0^{(1)} e^{-\pi\alpha/2} \quad \alpha \ll 1 \quad (5.67)$$

这结果表明 $R^{(1)}$ 不同于 $R_0^{(1)}$ 。这意味着在非线性量子力学中的微观粒子的波动特性不同于线性量子力学中的波动。

由以上结果, 可以决定微观粒子在散射时向前传输的粒子数 N_t 为 $N_t = \int_0^{+\infty} n_{\text{rad}}(\lambda) d\lambda$, 当 $\alpha \ll 1$ 时, 它小于 N_r , 并可表示成 $N_t \approx \varepsilon^2 \alpha^4 / 120 \xi^2 N$ 。但是在 $\alpha \gg 1$ 时, N_t 接近于 N_r 。

借助于反散射法可决定由此过程所发射的能量为 $E_{\text{rad}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx' (|\phi_{x'}|^2 - |\phi|^4)$, 这里 $b=2$ 。对应的发射能量密度为 $\dot{n}_{\text{rad}}(\lambda) = 4\lambda^2 n_{\text{rad}}(\lambda)$ 。则微观粒子发射的总能量就等于朝前 (E_t) 和朝后 (E_r) 能量的和。它们都能表示成

$$E_{t,r} = \int_0^{+\infty} \dot{n}_{\text{rad}}(\pm\lambda) d\lambda$$

对于由式 (5.61) 所示的非线性 Schrödinger 方程, 它们分别为

$$E_r = \frac{\pi}{2} \eta \left(1 - \frac{1}{3} \alpha^2 - \frac{2}{15} \alpha^4 \right), \quad E_t = \frac{2}{15} \eta \alpha^4 \quad \text{对于 } \alpha \ll 1$$

$$E_r \approx E_t = \frac{\pi^2 \eta \alpha^{9/2}}{16\sqrt{2}} e^{-\pi\alpha/2} \quad \text{对于 } \alpha \gg 1$$

按照 Kivahar 等人的方法, 可很快求出微观粒子被相距为 a 的两个杂质散射的特性。这时微扰杂质势可表示成: $\varepsilon f(x') = \varepsilon_1 \delta(x') + \varepsilon_2 \delta(x' - a)$ 。于是粒子谱密度可表示成

$$n_{\text{rad}}(\lambda) = \tilde{n}_{\text{rad}}^{(1)} \left\{ (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 4\varepsilon_1 \varepsilon_2 \cos^2 \left[\frac{1}{2} a \beta(\lambda) \right] \right\}$$

这里 $\tilde{n}_{\text{rad}}^{(1)}$ 和 $\beta(\lambda)$ 是由式 (5.64) 所定义的。在这种情况下, 微观粒子的反射系数 $R^{(2)}$ 由具有有效强度 $(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)$ 的一个孤立杂质的孤子散射和相关于两个杂质的共振散射效应所决定, 则此时反射系数可表示成

$$R^{(2)} = \frac{\pi \varepsilon^2}{2^8 \alpha \xi^2} \int_0^{+\infty} \frac{\left[(x'+1)^2 + \alpha^2 \right]^2}{\cosh^2 \left[\pi (x'^2 + \alpha^2 - 1) / 4\alpha \right]} \cos^2 \left[\frac{1}{4} d (x'+1)^2 + \alpha^2 \right] dx' \quad (5.68)$$

这里 $d = 2a\xi$ 。当 $\alpha \ll 1$ 和 $\alpha^2 d \ll 1$ ，式(5.68)退化为

$$R^{(2)} = 2R_0^{(1)} \left[1 + \frac{2\alpha d}{\sinh(2\alpha d)} \cos(2d) \right] \quad (5.69)$$

在小 α 时其反射系数 $R^{(2)}$ 与 d 的关系示于图 5.11 (a) 中。如果微观粒子尺度 ($\approx \eta^{-1}$) 大大超过 d ，即 $\alpha d \approx a\eta \ll 1$ 时，可显示干涉的特性，即 $R^{(2)}$ 中的参数 d 呈振荡的特性。不同于线性量子力学，由于在 $x' \neq 0$ 时的 $x' < \sinh x'$ ，则 $R^{(2)}$ 在 $d \rightarrow \infty$ 时不趋近于零。当 $d = d_{\min} = (1 - 2\alpha^2/3)d_n^0$ [这里 $d_n^0 = \pi/2 + n\pi (n=0,1,\dots)$] 时， $R^{(2)}$ 有一最小值 $R_{\min}^{(2)} = 2(\alpha d_{\min})^2/3 \approx (2d^2/3)(\pi/2 + n\pi)^2$ ；在 $d = d_{\max} = (1 - 2\alpha^2/3)n\pi$ 时会出现一个最大值为 $R_{\max}^{(2)} = 4R_0^{(1)} \left[(1 - n\alpha\pi/3)^2 \right]$ ，并随着 d 的增加而减少。当微观粒子的尺度变得和杂质间距 a 可比较，即 $\alpha d \approx 1$ 时，这种干涉效应会减弱。在 $\alpha d \ll 1$ 时， $R^{(2)}$ 接近于 $2R_0^{(1)}$ ，如图 5.11 (b) 所示。这意味着每一个杂质的散射都是独立的。这些结果表明微观粒子在这种散射中既具有波动特性 ($\alpha d \gg 1$)，又具有粒子的特性 ($\alpha d \ll 1$)。

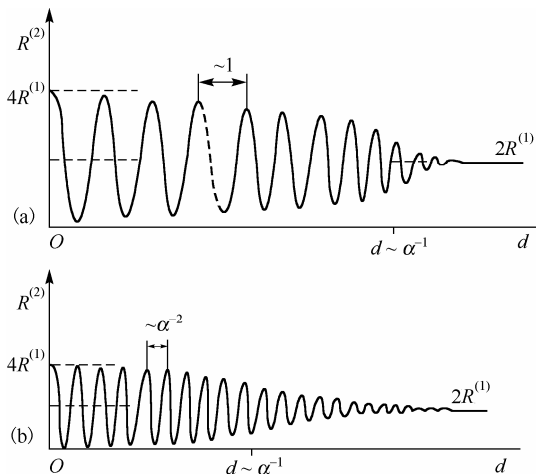


图 5.11 关于微观粒子在 $\alpha \ll 1$ (a) 和 $\alpha \gg 1$ (b) 情况下被在相距为 a 的两个相等杂质反射后的反射系数与值 $d = 2a\xi$ 的关系。图中 $R^{(1)}$ 表示一个孤立杂质的反射系数值

可将以上方法推广到相互相距为 a 的，周期性分布的 N 杂质组成的无序系统中。在 $N\alpha d \ll 1$ 的情况下，微观粒子被它们散射后的反射系数可表示成

$$R^{(N)} = R_0^{(1)} \left[N + 2 \sum_{k,l \neq 0}^{(N-1)/2} C_N^{2k+1} C_N^{2l+1} \sum_{m=0}^{k-1} (-1)^m C_{k-1}^m 2^{-2(N-m-1)} \times \right. \\ \left. \sum_{p=1}^{N-m-1} C_{2(N-m-1)}^{N-m-1+p} \frac{2\alpha dp}{\sinh(2\alpha dp)} \cos(2pd) \right]$$

这里 C_N^K 是二项式系数。在上式中, 方括号内的部分表示了它的一个整数部分。当 $N\alpha d \ll 1$ 时微观粒子是作为一个颗粒子而被散射, 并具有 $R(N) \approx NR_0^{(1)}$ 。

除了以上的反射效应外, 微观粒子还具有传输效应。其能量传输系数定义为 $T^{(E)} = E_t/E_i$, 这里 E_t 和 E_i 分别表示传输和入射粒子的能量。其粒子数的传输系数定义为 $T^{(N)} = N_t/N_i$, 这里 N_t 和 N_i 分别表示传输和入射粒子数。此时, 有 $E_i = E_t + E_r$ 和 $N_i = N_t + N_r$ 。因此, 可以通过公式 $T^{(E,N)} = (1 - R^{(E,N)})$ 从反射系数来决定这些传输系数。

当杂质浓度 ρ 很低, 而两个杂质之间的平均间距大于微观粒子时, 则可认为每个杂质的散射不是相关的, 即 $T = \prod_j T_j$, 这里 T_j 是第 j 个杂质的传输系数。由于这里存在有从第 j 个杂质传输的粒子刚好就是第 $j+1$ 个杂质的入射微观粒子的关系, 于是得到以下关系:

$$E_{j+1} = E_j T_j^{(E)}(E_j, N_j)$$

$$N_{j+1} = N_j T_j^{(N)}(E_j, N_j)$$

$$\begin{aligned} \Delta E_{j+1} &= E_{j+1} - E_j = -E_j R_j^{(E)}(E_j, N_j), \\ \Delta N_{j+1} &= N_{j+1} - N_j = -N_j R_j^{(N)}(E_j, N_j) \end{aligned} \quad (5.70)$$

当 $\alpha \ll 1$ 时, 有

$$T^{(N,E)}(x') = \frac{N(x')}{N(0)} = \frac{E(x')}{E(0)} = e^{-x'/\lambda_0}, \quad \lambda_0 = \frac{16\xi^2(0)}{\rho\epsilon^2} = \frac{1}{\rho R^{(1)}}$$

这里 $R^{(1)}$ 是一个杂质的反射系数。上式表明传输系数是指数衰减的。

当 $\alpha = \eta/\xi \geq 1$ 时, Kivshar 等人求出了 $T^{(N,E)}(z = x'/x'_0)$ 随参数 $\alpha(0) = \eta(0)/\xi(0)$ 的改变是渐近变化的, 这里 $x'_0 = 64/\pi\rho\epsilon^2$, $\alpha(0)$ 是相关于入射粒子的非线性性质。结果表明 α 数越大, 微观粒子出现的激发越多, 但它们的空间尺度越小。

在上述讨论中仅把杂质看成一个有效势去散射微观粒子。实际上这个杂质可提供具有吸引力的势阱来自陷微观粒子, 形成一些束缚的粒子-杂质的束缚态或共振态, 此时常有一部分能量被释放。而微观粒子也可以将自己能量的一部分转移给杂质。共振态的形式必须是粒子释放的能量刚好能被杂质全部吸收的条件下才能形成。因此, 微观粒子在杂质上的散射现象十分复杂。

5.6 在电磁场作用下的微观粒子的特性

在电磁场作用下, 微观粒子满足的非线性 Schrödinger 方程在 $\hbar = m = c = 1$ 的自然单位制下应当写为

$$i\frac{\partial}{\partial t}\phi(\vec{X},t)=\left\{-\frac{1}{2}\left[\nabla-\frac{1}{2}i\vec{B}(t)\times\vec{X}\right]^2-\vec{E}(t)\cdot\vec{X}\right\}\phi(\vec{X},t)+b|\phi(\vec{X},t)|^2\phi(\vec{X},t) \quad (5.71)$$

式中, $\vec{X}=(x,y,z)$ 表示粒子的 Cartesian 坐标; $\vec{E}(t)$ 和 $\vec{B}(t)$ 表示与时间有关的均匀电磁场的电场和磁场强度。它们可以用通电螺旋管中的电磁场来近似模拟。严格来讲, 此时电场为 $\vec{E}=\frac{1}{2}\dot{\vec{B}}\times\vec{X}$ 。在自然单位中, 上述方程中剩下的各种常数都归到了 X, t, B, E 和 ϕ_0 的表示式中, 同时这里 b 取为 ± 1 。显然, 如果用 ϕ^* 代替 ϕ 时, 上方程中的动能项的符号改变。现在假设 $\vec{B}=(0,0,B)$, $\vec{E}=(E_1,E_2,0)$, 从前面的研究可知, 现可设此方程的解具有以下形式:

$$\phi(\vec{X},t)=\varphi(\vec{r},t)\exp\left(ikz-\frac{1}{2}ik^2t\right) \quad (5.72)$$

式中, $\vec{r}=(x,y)$; k 是实参数, 将此解代入上述方程式 (5.71) 中, 可得

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t)=\left[-\frac{1}{2}\Delta-\omega(t)L+\frac{1}{2}\omega^2(t)r^2-\vec{E}(t)\cdot\vec{r}+b|\varphi(\vec{r},t)|^2\right]\varphi(\vec{r},t) \quad (5.73)$$

Δ 表示二维 Laplacian 算符

$$L=-i\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right), \quad \vec{E}=(E_1,E_2), \quad \omega=\frac{B}{2}$$

Takagi 等人曾对线性量子力学中的微观粒子在电磁场中运动的特点做过研究, 并求解了相应的线性 Schrödinger 方程。于是他们用了类似的方法对式 (5.73) 的解做了研究。

首先, 将 φ 转换到转动参考系中去表示, 即做变换

$$\varphi(x,y,t)=\varphi'(x\cos\theta(t)-y\sin\theta(t),x\sin\theta(t)+y\cos\theta(t),t) \quad (5.74)$$

这里 $\theta(t)=\int_0^t\omega(t')dt'$, 则式 (5.73) 现变成

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi'(\vec{r},t)=\left[-\frac{1}{2}\Delta+\frac{1}{2}\omega^2(t)\vec{r}^2-\vec{E}'(t)\cdot\vec{r}+b|\varphi'(\vec{r},t)|^2\right]\varphi'(\vec{r},t) \quad (5.75)$$

这里 $\vec{E}'=(E'_1,E'_2)$, 其中 $E'=E_1\cos\theta-E_2\sin\theta$, $E'_2=E_1\sin\theta+E_2\cos\theta$ 。

现引入满足方程 $a(t)+a(t)\omega^2=0$ 的正标度函数 $a(t)$, 并设 $a(0)=1$, 定义标度时间为 $\tau(t)=\int_0^ta^{-2}(t')dt'$ 。同时, 将 φ 变换到伸缩参考系中, 则有

$$\varphi'(\vec{r},t)=a^{-d/2}(t)\varphi'(\vec{r}/a(t),\vec{r}(t))\exp[i\dot{a}(t)\vec{r}^2/2a(t)] \quad (5.76)$$

这里 $d = 2$ 是空间维度。经此变换后可消去了式(5.75)中的谐振势，但立方非线性项在此变换下仍保持不变。于是上述方程变成

$$i \frac{\partial}{\partial t} \varphi'(\vec{r}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta - \tilde{E}'(t) \cdot \vec{r} + b |\varphi'(\vec{r}, t)|^2 \right] \varphi'(\vec{r}, t) \quad (5.77)$$

这里 $\tilde{E}'(\tau) = a^3(t(\tau))\tilde{E}(t(\tau))$ ，而 $t(\tau)$ 是以上 τ 的逆变换项式。最后，引入与时间相关的矢量 $\vec{R} = (R_1, R_2)$ ，它是方程 $\frac{d^3 \vec{R}}{d\tau^3} = \tilde{E}'$ 的解，即

$$R(\tau) = \int_0^\tau d\tau' \int_0^{\tau'} \tilde{E}'(\tau'') d\tau'' \quad (5.78)$$

再引入相关的速度 $\vec{u}(\tau) = (u_1, u_2) = d\vec{R}/d\tau$ ，运用这些矢量并通过重新定义一个新的函数 Φ 为

$$\Phi(\vec{r}, \tau) = \varphi'(\vec{r} - \vec{R}(\tau), \tau) \exp \left\{ i \vec{u}(\tau) \cdot \vec{r} - \frac{1}{2} i \int_0^\tau \vec{u}^2(\tau') d\tau' \right\} \quad (5.79)$$

从而完成了依赖于时间的变换，可得到 $\Phi(\vec{r}, \tau)$ 满足

$$i \frac{\partial}{\partial \tau} \Phi(\vec{r}, \tau) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + b |\Phi(\vec{r}, \tau)|^2 \right] \Phi(\vec{r}, \tau) \quad (5.80)$$

这是一个没有电磁场 \vec{E} 和 \vec{B} 的(1+2)维的非线性 Schrödinger 方程。则经过以上三个变换后把一个处于外加电磁场中的微观粒子的动力学方程改变成一个无电磁场效应的非线性 Schrödinger 方程。Jakaji 将上述方程的解表示为以下形式

$$\Phi(\vec{r}, \tau) = f(x, \tau) \exp \left(i v_2 y - \frac{1}{2} i v_2^2 \tau \right) \quad (5.81)$$

式中， v_2 是实参数。在吸引势型的自相互作用 ($b = -1$) 的情况下，式(5.81)的单孤立子解为

$$f(x, \tau) = \mu \operatorname{sech}(\mu(x - x_0 - v_1 \tau)) \exp \left(i v_1 x - \frac{1}{2} i (v_1^2 - \mu^2) \tau \right) \quad (5.82)$$

式中， μ, x_0 和 v_1 是实参数，这样可以把方程式(5.71)的整个解写成

$$\phi(\vec{r}, t) = \frac{\mu}{a(t)} \operatorname{sech} \left\{ \frac{\mu}{a(t)} [\vec{n} \cdot \vec{r} - b(t)] \right\} \exp[iD(\vec{r}, t)] \quad (5.83)$$

式中， $n(t) = (\cos \theta - \sin \theta)$ ， $b(t) = [x_0 + R_1(\tau) + v_1 \tau] a$

$$D(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{2} \dot{a} \vec{r}^2 + \vec{k} \cdot \vec{r} \right) \Big/ a - \vec{v} \cdot \vec{R}(\tau) - \frac{1}{2} (v^2 - \mu^2) \tau - \frac{1}{2} \int_0^\tau \vec{u}^2(\tau') d\tau'$$

而 $\vec{v}(\tau) = (v_1, v_2)$, $\vec{k} = (\mu_1 \cos \theta + \mu_2 \sin \theta + \mu_1 \sin \theta + \mu_2 \cos \theta)$, $(\mu_1, \mu_2) = \vec{v} + \vec{u}(\tau)$ 。

所求得解, 即式(5.82)的初始条件为

$$\Phi(\vec{r}, 0) = \mu \operatorname{sech} [\mu(x - x_0)] \exp \left[\frac{1}{2} i \dot{a} \vec{r}^2 - i \vec{v} \cdot \vec{r} \right] \quad (5.84)$$

这表明包络式(5.82)在沿方向 $\vec{n}(t)$ 传播时发生了旋转, 其旋转的瞬时频率是 Larmor

频率 $\omega(t)$ 或回旋频率 $B(t)$ 的一半。此时, 旋转中心 $b(t)$ (即从原点起的半径间距) 随时间的变化满足受迫谐振动方程

$$\ddot{b}(t) + \omega^2 b(t) = E_1 \cos \theta - E_2 \sin \theta \quad (5.85)$$

同时, 此波动解的峰高和宽度又受标度因子 a 的调制。

现在来研究一个简单的例子, 即 $\vec{E} = \vec{v} = 0$ 的恒定磁场和 ω 是正时的情况。此时选择 $a = \cos t$, 则解为

$$\phi(\vec{r}, t) = \frac{\mu}{\cos \omega t} \operatorname{sech} \left\{ \mu \left[(x - x_0) - y \tan \omega t \right] \right\} \exp \left[\frac{1}{2} i \left(\frac{\mu^2}{\omega} - \omega r^2 \right) \tan \omega t \right] \quad (5.86)$$

这表明在磁场作用时, 初始场(组态)为 $\phi(r, 0) = \mu \operatorname{sech}(\mu(x - x_0))$ 的微观粒子会随时间的

的增加而衰减, 并可能在时间为 $\pi/2\omega$ 时会出现倒塌, 并在其寿命时间的范围内转动了 90° 。同时, 这个解在时间不等于 $\pi/2\omega$ 的其他时间内是不存在的。

下面研究在 $0 \leq t < t_0$ 的时间间隔内加一个恒定磁场, 在这时间之外无外场, 则 t_0 是一个比 $\pi/2\omega$ 小的量。此时可选 $a = \cos \omega t$ 。在 $t > t_0$ 时, $a = \cos \omega t_0 - (t - t_0)\omega \sin \omega t$ 。则上述方程在上述初始条件下的解仍是式(5.82), 但此时它在 $t_0 + \omega^{-1} \cos \omega t_0$ 的时间内会倒塌。在 $a = \cos(\omega(t_0 - t))/\cos \omega t_0$ ($0 < t < t_0$) 和 $a = \cos \omega t_0$ ($t > t_0$) 的条件下, 再选择初始条件为 $\phi(\vec{r}, 0) = \mu \operatorname{sech}(\mu(x - x_0)) \times \exp\left(\frac{1}{2} i \vec{r}^2 \omega \tan \omega t_0\right)$, 则在 $t > t_0$ 时其解应为

$$\phi(\vec{r}, t) = \tilde{\mu} \operatorname{sech} [\tilde{\mu}(x \cos \omega t_0 - y \sin \omega t_0) - \mu x_0] \exp \left[\frac{1}{2} i \mu^2 (t - t_0 + \omega^{-1} \tan \omega t_0) \right] \quad (5.87)$$

这里 $\tilde{\mu} = \mu \cos \omega t$, 这个解表明此粒子形态在转动约 ωt_0 的角度后, 其标度改变了

$\cos \omega t_0$ ，但它的寿命却变为无穷大了。

式(5.71)中 $b = +1$ 时的 kink 解在有磁场时是不稳定的。但在它的寿命时间内，可通过外加与时间相关的电磁场来控制它们的运动。

当然，可用以上类似方法处理 $(1+d)$ 维带电粒子满足非线性 Schrödinger 方程

$$i \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta + \frac{1}{2} \omega^2(t) \vec{r}^2 - \vec{E}'(t) \cdot \vec{r} + b |\phi(\vec{r}, t)|^{d/4} \right] \phi(\vec{r}, t) \quad (5.88)$$

的解及其特点。这一方程描述了具有短程力的带电玻色子物理系统的非线性特性，其中 $\phi(\vec{r}, t)$ 表示了该粒子的量子场算符，其经典解的形式和以上结果类似，不再列出。

以上研究表明带电的微观粒子在电磁场中运动时仍能保持钟型孤子的状态，它的状态仍是包络波被载波携带而传播。但是，与式(3.156)～式(3.176)的孤波解不同的是它的振幅、群速度和相速度以及它的大小和宽度等都发生了很大变化，并在一定条件下可衰减。这些都是由于电磁场引起的。

5.7 微观粒子在空间周期性外势场中的运动特性

处在空间周期性外势场中的微观粒子满足的非线性 Schrödinger 方程为

$$i \phi_t + \phi_{x'x'} + b |\phi|^2 \phi = \phi \cos(kx') \quad (5.89)$$

此处 $x' = x\sqrt{2m/\hbar}$, $t' = t/\hbar$ 。这里仅研究存在于此体系中的微观粒子的空间宽度大大小于周期势的空间大小的条件下的特点。此时，由粒子的运动产生的辐射可以忽略不计。同时，假设此周期性外势场的场强较小，以至于可以把它当成一种微扰来看待。在此情况下引入一个小参量 ε ，在 $b=2$ 时，式(5.89)可以写成

$$i \phi_t + \phi_{x'x'} + 2 |\phi|^2 \phi = \varepsilon \phi \cos(kx') \quad (5.90)$$

Scharf 等人应用集体坐标 q 研究了这个问题。他们把式(5.90)的一个单孤立子可写成

$$\phi(x', t') = 2\eta \frac{\exp(iqx'/2 - i\theta)}{\cosh[2\eta(x' - q)]} \quad (5.91)$$

式中， η 是粒子的振幅； θ 是由于微扰存在而引起的相移。方程式(5.90)有两个运动积分，即粒子数 N 和能量 E 。它们可表示成

$$N = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx = 4\eta \quad (5.92)$$

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[|\phi_{x'}|^2 - |\phi|^4 + \varepsilon |\phi|^2 \cos(kx') \right] dx = \eta \left[\dot{q}^2 - \frac{16}{3} q^2 \right] + \frac{\pi \varepsilon k}{\sinh(\pi k/4\eta)} \cos(kq) \quad (5.93)$$

由于 ϕ 的粒子数守恒可导致 $\eta = \text{constant} + O(\varepsilon^2)$ ，而相移的时间依赖性用粒子位置 q 的时间依赖性表示。集体坐标 q 可以看成为粒子的动力学变量。由能量 E 的守恒可以导出 q 的运动方程，即 q 的运动方程可由单粒子(单孤子)的有效哈密顿量

$$H_1 = \frac{p^2}{2\eta} + \frac{\pi \varepsilon k}{2 \sinh(k\pi/4\eta)} \cos(kq) \quad (5.94)$$

推出，此时的有效势的振幅被非平庸地重新标度。仅在 $k/\eta \rightarrow 0$ 的极限下，可重新得到它前面的系数因子 $2\varepsilon\eta$ 。上述问题可以通过展开局域的微扰势来首先求得位置的线性项，再求得其微扰的非线性 Schrödinger 方程的解。如果用 $ax' + b$ 代替式(5.90)中的微扰项 $\cos(kx')$ ，则此时方程是可积的，这已在前面研究过。但上述微扰势的非零曲率值的存在会使系统产生辐射。其实际辐射的功率可以通过在势能的极小值附近适当地选择振幅的振荡周期的大小来使它的减少变成为可忽略的程度。

相对于式(5.94)的粒子的有效势可以表示为 $V_{\text{eff}}(q) = \pi \varepsilon k \text{csch}\left(\frac{\pi k}{4\eta}\right) \cos(kq)$ ，它是从 $V_{\text{eff}}(q) = 4\eta 2\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \text{sech}[2\eta(x' - q)] V(x') dx'$ 求得的。由此，Scharf 等人求得了集体坐标 q 随时间的变化满足方程

$$\frac{d^2 q_i}{dt'^2} = -(2\eta)^{-1} dV_{\text{eff}}/dq_i \quad (5.95)$$

它与式(4.16)或式(4.25)类似。再次证明在非线性量子力学中的微观粒子满足经典运动规律。此时 2η 相当于该粒子的有效质量。

现在，首先研究忽略微扰($\varepsilon = 0$)时在这个集体坐标系中粒子的碰撞特性。当两个粒子相互碰撞时，它们的质量中心 q_i 和相位 θ_i 都要发生改变。但由于微扰的式(5.90)具有 $U(1)$ 不变性，则可忽略相位的动力学变化。

同时, 粒子位置(质心) q_i 的变化(空间位移)相当于在这些粒子之间存在一个相互吸引作用。例如, 对于由两个碰撞的粒子组成的系统, 其中一个粒子的状态具有

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} |\phi| = \text{sech}[\eta(x - \varepsilon) \pm \alpha] \quad (5.96)$$

的状态, 当 $t \rightarrow -\infty$ 时, 粒子在右边; $t \rightarrow +\infty$ 时, 该粒子运动到左边。而此系统中的另一个粒子刚好相反, 它的位移 a 应当用 $-a$ 代替, 其中位移 a 由下式给出:

$$a = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{16(\eta_1 + \eta_2)^2 + (v_1 - v_2)^2}{(v_1 - v_2)^2} \right) \quad (5.97)$$

式中, v_1 和 v_2 是分开的两个粒子的运动速度; η_1 和 η_2 是它们的振幅。一个简单的计算可以得到具有相同空间位移的双粒子哈密顿量表示为

$$H_2 = \frac{p_1^2}{2\eta_1} + \frac{p_2^2}{2\eta_2} - 8\eta_1\eta_2(\eta_1 + \eta_2)\text{sech}^2\left(\frac{2\eta_1\eta_2(q_1 - q_2)}{\eta_1 + \eta_2}\right) \quad (5.98)$$

显然, 由以上的单粒子哈密顿量 H_1 和具有吸引相互作用的双粒子哈密顿量 H_2 的形式可以外推去给出一个 N 粒子系统的有效哈密顿量 H_{eff} , 它应表示为

$$H_{\text{eff}} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{p_i^2}{2\eta_i} + \frac{\varepsilon k \pi \cos(kq_i)}{2 \sinh(k\pi/4\eta_i)} \right] - 8 \sum_{1 \leq i < j \leq N} \eta_i \eta_j (\eta_i + \eta_j) \text{sech}^2\left(\frac{2\eta_i \eta_j (q_i - q_j)}{\eta_i + \eta_j}\right) \quad (5.99)$$

此哈密顿量可以用来描述 N 个非谐振耦合的非线性摆的运动特性, 在 $N=2$ 时, 它是可积的。由此看到, 即使是没有辐射效应存在的两粒子系统, 由于有微扰存在, 则相应的非线性 Schrödinger 方程式 (5.90) 也是不可积的。

为此, Scharf 等人用数值研究此情况下粒子的特点。在接近连续的情况下, 采用 Ablowitz 和 Ladik 对非线性 Schrödinger 方程的可积描述法及第五阶和第六阶 Runge-Kutta-Varner 积分法, 他们得到一个微分差分方程式, 并用守恒量 N 和 E 监督数值积分的准确值, 再使用一个振幅超过给定最小值的局域极大值的三点式吻合法,

Scharf 和 Bishop 等人数值性地求出了分立的粒子位置轨迹。图 5.12 给出了具有振幅为 η_1

和

η_2 ($\eta_1 \neq \eta_2$) 的, 并处于余弦势中的两个粒子的碰撞情况。从图中可看出这两个粒子发生过多次碰撞, 它们的位置(实线)发生了改变。图 5.13 示出了具有 $\eta_1 \neq \eta_2$ 和固定能量 ($H_{\text{eff}} = E_0$) 及 $q_2 = 0$ 的两个粒子的 Poincaré 截面图。从图中可看到混沌区域出现在由能量 $E_1 = \varepsilon k \pi / 2 \sinh(k\pi/4\eta_1)$ 决定的单孤子的分叉点的附近。出现的这一混沌区域可以这

样来理解：如果第一个粒子的能量稍低于分叉点的能量 E_1 ，则它会在势能的极小值附近被捕获，并与第二个粒子碰撞。由于第一个粒子能越过这个势垒，从而导致一个空间移动。这种现象取决于导致具有正的 Lyapunov 指数的两个粒子的初始条件。

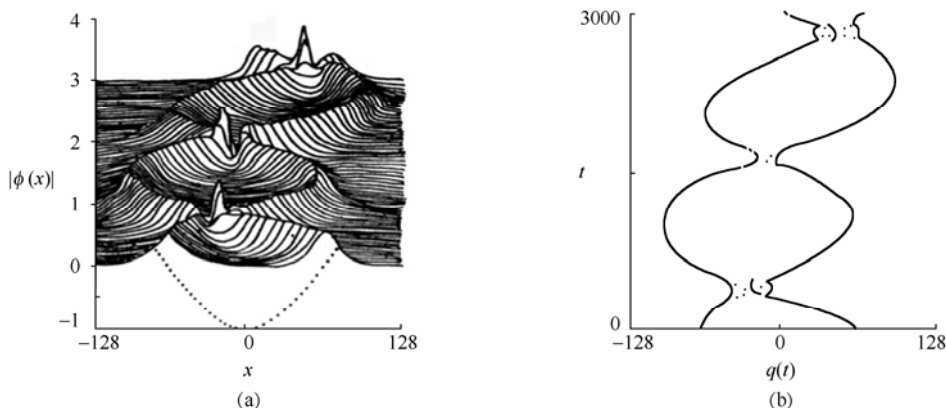


图 5.12 在余弦周期势微扰作用下的两微观粒子的碰撞特性。这里 $V(x') = q \cos\left(\frac{2\pi x'}{256}\right)$, $\varepsilon = 0.01$, $\eta = 0.045$; 初始值为 $q_1(0) = -64$, $q_2(0) = 64$, $p_1(0) = 0$, $p_2(0) = 0.085$, (a) 是微扰后, 非线性 Schrödinger 方程的完全解, (b) 是完全解的位置 (实线) 与两粒子有效动力学 (交叉点) 的比较

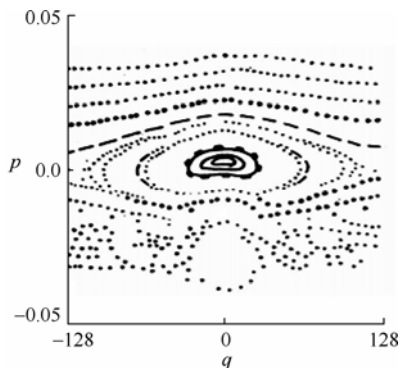


图 5.13 有效两粒子动力学的 Poincaré 截面图。这里 $V(x') = \varepsilon \cos\left(\frac{2\pi x'}{256}\right)$, $\varepsilon = 0.1$, 周期性边界条件为 $\eta_1 = \eta_2 = 0.05$, 固定能量为 $E_0 = 0.015\ 252$, $q_2 = 0$, 积分时间为 $T = 40\ 000$

现在来简单讨论由快粒子束引起的陷落及粒子的孤子态的针扎效应的消除。对于具有一定通量的快粒子从左边进入到由 N 粒子组成的系统时, 将导致系统中的粒子在入射的相反方向上发生周期性的空间移动。若适当选择入射粒子的密度以及它们的参量 η_i 和 v_i , 可以使势阱中的粒子产生强的拖拽作用, 从而可克服势垒, 使被针

扎的粒子运动。这种针扎的消除导致入射粒子流形成相反方向的出射粒子流。可以很简单地求出这个针扎效应消除的阈值。事实上，如果在势阱中的粒子和入射粒子有相等的质量 η ，并且入射粒子运动又很快时，这个碰撞可以在某一瞬间发生。碰撞后使处于势阱中的粒子在空间上产生一个移动，其值为 $\Delta q = a/\eta$ （但它们的速度未发生改变），从而导致了势阱中粒子能量的变化。这种能量变化可由入射粒子的能量来补偿。则一个处在势阱中具有能量为 $E = H_1(p, q)$ 的粒子，在第一次碰撞后能离开势阱的条件是

$$H_1(q + \theta/\eta, p) > \frac{\pi \varepsilon k}{2 \sinh(\pi k/4\eta)} \quad (5.100)$$

在势阱中的粒子虽然可能失去能量，但也可以通过碰撞得到能量。所得到的能量多少完全取决于在碰撞的瞬间它们在势阱中所处的位置。在稳定条件下，通过同一粒子束的共振碰撞能够导致针扎的消除，图5.14示出了这个过程。此结果是借助于有效两粒子近似法，通过双周期共振方式得到的。

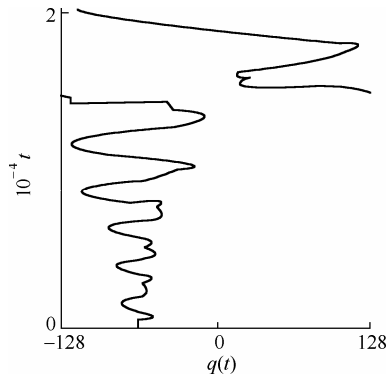


图 5.14 在势阱无变化时，由粒子运动引起的初始粒子的针扎效应的消除。这里 $V(x') =$

$\varepsilon \cos\left(\frac{2\pi x'}{256}\right)$, $\varepsilon = 0.02$ 。在周期性边界条件及 $\eta_1 = \eta_2 = 0.025, q = \pm 64$ 时，它有两个势能的极小值。在初值为 $q_1(0) = -64, q_2(0) = 64, p_1(0) = 0, p_2(0) = -0.0115$ 时，求出了粒子的两个有效位置。其中直线为快粒子的位置，不规则线是针扎消除后粒子的位置

总之，对于一个具有孤子态解的非可积微扰的非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子，通过使用粒子的集体坐标表示式，不但能够给出单粒子哈密顿量，而且能得到多粒子哈密顿量，并可用来研究双粒子之间的相互作用。其时系统的动力学特性是可积的。两粒子的碰撞会出现混沌状态，处在混沌区域之外时，两粒子的状态是稳定的。

借助于所得到的这些有效哈密顿量可以用来研究多粒子系统中的相互作用效应。

由式(5.91)描述的微观粒子具有特定的大小,现用 L_s 来标志它。若用 L_p 来表示微扰势的宽度,则在 $L_s > L_p$ 时,微观粒子就能够覆盖多个势垒;但在 $L_p > L_s$ 时,微观粒子仅经历了部分势场。在 $L_s \sim L_p$ 的中间情况时,微观粒子的行为就较为复杂,无法用无微扰动力学来研究它。

Scharf 等人数值模拟了由式(5.90)~式(5.98)描述的微观粒子的动力学特性,得到许多新的结果。例如,当粒子的宽度比微扰势的长度小时,除了它的质心运动不能忽略外,粒子的其他所有自由度都是可以忽略的。相反于全动力学的情况,这种约化的动力学系统是可积的,可用有效哈密顿量式(5.94)和式(5.97)及式(5.98)来研究其动力学特性。如果微观粒子的宽度是大于微扰势的一个特征长度,则粒子的特征量可以用对这个势能空间的平均值来表示,从而展示出粒子的波动特征。

从具有 $V(x')=\cos(kx')$ 的式(5.90)和由式(5.91)给出的大尺度的微观粒子($\eta \gg k$), Scharf 求出了在微扰势达到小参量 εk^{-2} 的第二阶时式(5.91)的修正值,其形式为

$$\phi_\varepsilon(x',t') = \phi_0(x',t') \left[1 + \frac{\varepsilon}{k^2} \phi_1(kx') \right] \quad (5.101)$$

式中,

$$\phi_1(kx') = -\frac{\cos(kx') - i(\dot{q}/k)\sin(kx')}{1 - (\dot{q}/k)^2} \quad (5.102)$$

其中 $\phi_0(x',t')$ 由式(5.91)表示,这表明由于微扰的存在,使无微扰方程的裸粒子(孤子)“穿上了衣服”。后者是参数被重新归一化后的非微扰有效非线性 Schrödinger 方程的解。这个“穿了衣服”的微观粒子的行为像一个附属有额外长波长微扰的裸孤子。它的质心运动能够用一个有效单粒子哈密顿量描述。当两个“穿衣服”的微观粒子碰撞时会重新出现在传播中特性不变化的粒子特征。从式(5.100)可以看到,此时存在两种类型的“穿衣服”的微观粒子(即慢和快的粒子),这由条件是 $\dot{q} \ll k$, 还

是 $\dot{q} \gg k$ 来区分。其“穿衣服”的慢微观粒子是被空间调制的,在微扰势的极小区有最大的延展。而快的粒子的最大延展出现在微扰势的最大值区,它们用一个能导致微观粒子破坏的“相共振”区分开。

这种分析能够推广到包含有多个短波长和一个任意长波长部分的一般准周期势的系统。在长波长有效势下,所得到的“穿衣服”的微观粒子不但具有粒子特性而且有复杂的状态,它既会出现上述“相共振”($\dot{q} \approx k$),又会出现“形状共振”($\eta \approx k$)。

但是, 在一个微扰势中具有相对速度趋于零的两个粒子的碰撞不再能用式(5.98)的两粒子有效哈密顿 H_{eff} 来描述。并且在集体坐标变量表示法中伴演质量的孤子特征参数 η_i 不再是一个常数, 而变成了一个动力学变量。但因此时产生的辐射仍可忽略, 则可以使用一个推广的集体变量描述。至于三个或更多粒子组成的系统中, 若存在有微扰时它们的同时碰撞所产生的效应不能再用一个有效两粒子相互作用的模型来处理。由“穿衣服”的微观粒子产生的辐射具有 η/k 的高阶效应, 因此, 必须很好考虑两个“穿衣服”的微观粒子的非相对论碰撞所导致的能量辐射的显著增加, 后者具有 η/k 的高阶效应。这种效应是由于微观粒子本身具有的波动性引起的。因此, 上述现象的存在证明了在非线性量子力学中的微观粒子具有波-粒二象性的特点。

习题

说明: 以下有些习题(*)较难做, 请根据实际情况选择较简单的完成。

1. 在非线性量子力学中微观粒子的碰撞和散射特点与线性量子力学中的粒子的碰撞和散射有何具体不同? 其相应的理论描绘又有何差异?

2. 用4阶 Runge-Kutta 方法数值模拟由方程组[式(5.14)和式(5.15)]描绘的粒子的非线性传播特性。

*3. 用微扰法求解在微扰势 $\varepsilon|\phi|^4\phi$ 下方程式(5.32)的解。

*4. 用集体坐标 q 法求出方程式(5.84)的单孤子解, 并推导出式(5.89)。

第 6 章 非线性相互作用和微观粒子的局域

本章主要研究非线性相互作用的效应和与粒子局域的关系，阐明了非线性相互作用产生的根源和机理。这些机理可以概括为以下三点：第一是粒子间固有的相互作用和自相互作用的机理；第二是介质的非线性效应产生的自聚焦机理；第三是粒子和背景场相互作用的自陷机理。同时，说明了非线性初始微扰对粒子的局域和孤子运动特性的影响。最后，用光波和水波的自聚焦和自凝聚的实验来间接地论证微观粒子的局域性的形成特点。

如我们所知，粒子和波是物质存在的两种不同形式。波动的一个最大特点就是弥散性，分布于所存在的整个空间中，用频率、波长和振幅等物理量来标志其特征。它的运动表示为振幅和波矢的时空变化。但一提起粒子，它一定有确定的质量、位置和动量等特性。所谓粒子的运动，便是其位置和动量在时空中的改变。在经典物理学中，波动性和粒子性不可能由同一物质所具有。但在微观世界中的物质，由德布罗意关系和戴维孙与革末及塔尔塔科夫斯基等人的镍单晶和细晶体粉末以及单缝和双缝衍射实验证实了具有波-粒二象性，即微观粒子既具有波动性又具有粒子性。但这种二象性既不是波由粒子组成，也不是粒子由波组成的物理图像。然而，线性量子力学的理论是不能清楚解释这种物理图像的，因为它仅能描述粒子的波动性，不能确定其粒子性。但是，如前几章所讲的，在非线性量子力学理论中，微观粒子同时具有这两种特性，其波-粒二象性的物理图像十分清楚，既可用解析形式如 $\phi = \varphi e^{i\theta}$ [如式(3.95)或式(3.156)]表示出来，又可用图 3.7 形象地展示出来。从而与德布罗意关系和戴维孙等人的实验结果相吻合。现在的问题是这个理论为什么能使粒子局域而具有波-粒双重性。显然，这与所受的非线性相互作用紧密相关。但是，为什么非线性相互作用能使粒子局域？这些非线性相互作用又是如何产生的？它具有什么特点？，等等，这些问题都值得研究，也应当弄清楚。只有这些问题弄清楚和解决，并证实这些非线性相互作用在实际物理系统中真实存在，我们才能说非线性量子力学反映了真实物理情况，于是它才是正确的。因此，研究这些问题非常重要。本章就解决这些问题。

6.1 色散效应和非线性相互作用

6.1.1 色散效应

何谓色散效应呢？此概念最早来源于一束白光通过三棱镜后分解为七种不同频率的光学现象，确切地称为光的散射。其介质称为色散介质。由于光波是一种特

殊的波动，此后研究得知几乎所有线性波在很多媒质中都有色散的特性。此特性常用波的波长和它的频率关系来标志，常表示成 $\omega = \omega(\vec{k})$ 或 $G(\omega, \vec{k}) = 0$ ，应具有

$$\det \frac{\partial^2 \omega}{\partial k_i \partial k_j} \neq 0 \text{ 或 } \frac{\partial^2 \omega}{\partial^2 k^2} \neq 0 \text{ 的特性。在线性量子力学中，线性 Schrödinger 方程式(1.12)}$$

就是一个标准的色散方程。如果把在 $V(\vec{r}) = 0$ 的解式(1.13)代入该色散方程中，便可得到 $\omega = \hbar k^2 / 2m$ ，这里 $E = \hbar \omega$, $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ 。其相速度 $v_c = \omega/k$ ，此处 k 表示了波的传播方向，称为波矢。于是微观粒子的相速度可表示成 $\vec{v}_c = (\omega/k^2) \vec{k}$ ，这是色散关系的另一种表现形式。故线性 Schrödinger 方程式(1.7)具有一个色散波解。

但是，色散的本质是什么？它对波的传播有何影响？等等。这些问题值得研究。为此，现在研究一波包的色散效应。在线性量子力学中，常用波包来说明微观粒子具有的粒子性。一般来讲，其波包是由具有波矢为 k ，处在 $2\Delta k$ 间隔之内的若干平面波叠加的结果。在一维情况下，它常表示为

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} \psi(k, t) e^{i(kx - \omega t)} dk \quad (6.1)$$

其波包的群速度为 $v_g = \left. \frac{\partial \omega(k)}{\partial k} \right|_{k=k_0} = \hbar k_0 / m$ ， $\hbar k_0$ 是波色的平均动量。如果开始时波包

局域在 l_0 的一段间隔内，则 $\Delta k = \pi / 2l_0$ 。可以证明，经过一段时间 t 后，这个波包的

长度将会改变为 $l_t = \sqrt{l_0^2 + \left(\frac{\hbar t}{ml_0} \right)^2} > l_0 = \frac{\pi}{2\Delta k}$ 。这表明随时间的 t 增加，波包的大小将

会延伸。当 $t > ml_0 / \hbar$ ，这个波包将要倒塌。因此，它是不稳定的。现将波包的角频率 $\omega(k)$ 展开为

$$\omega = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \Delta k + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2 \omega}{dk^2} \right)_{k_0} (\Delta k)^2 + \dots \quad (6.2)$$

若仅考虑前两项，则色散关系为

$$\omega = \omega_0 + \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} \xi' \quad (6.3)$$

这里 $\xi' = \Delta k = k - k_0$ ，则有

$$\begin{aligned}
 \Psi(x,t) &= \psi(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} d\xi e^{i \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right] \xi} \\
 &= 2\psi(k_0) \frac{\sin \left\{ \left[x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t \right] \Delta k \right\}}{x - \left(\frac{d\omega}{dk} \right)_{k_0} t} e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} \quad (6.4)
 \end{aligned}$$

此时 $e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}$ 的系数就是波包的振幅。在 $x=0$ 时，其振幅最大为 $2\psi(k_0)\Delta k$ ，但在 $x = x_n = n\pi/\Delta k$ ($n = \pm 1, \pm 2, \dots$) 时为 0。图 6.1 示出了波包的振幅随传播距离的增加而衰减的情况。之所以有衰减是由于线性 Schrödinger 方程式 (1.12) 存在式 (6.3) 的色散关系的缘故。因此，可得出介质的色散直接导致了微观粒子或波动的衰减，从而最终会使波包倒塌。因此，用波包是不能表示微观粒子的粒子特性的。于是，色散的本质就是使波动或微观粒子衰减和坍塌。

但是在非线性量子力学中的动力学方程式 (3.2)～式 (3.5) 中，除存在有色散动能项外还存在非线性相互作用。它能抑制和抵消色散的衰减效应，从而使微观粒子变成一个稳定的和局域的孤子，而具有明显的粒子性。为什么非线性相互作用具有如此功能呢？这种效应的本质到底是什么？这很值得深入研究。

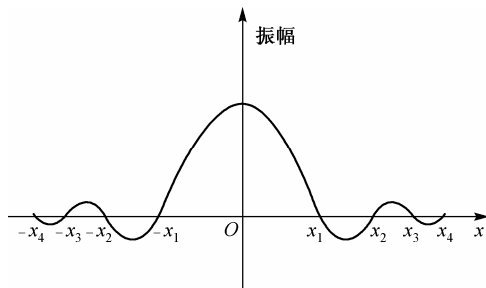


图 6.1 波包色散时的振幅随传播距离的增加而衰减的情况

6.1.2 非线性相互作用的效应

为了解非线性相互作用的具体效应，现转去考察能可直观观察的海水中的水波运动。当一列水波接近海岸时，它的形状会逐渐从正弦截面变成三角截面，最终变成运动速度极快的尖峰截面。如图 6.2 所示，水波的这种变化是由于受到非线性相互作用的影响。当它接近海岸时，由于非线性作用急剧增强，水波还会被破坏。因此，非线性作用的本质也是使波发生畸变乃至破坏。在非线性的作用下，波的传播速度取决于波的高度 h 。如果波的相速度用 v_c 表示，则它们有如下关系：

$$v_c = \frac{\omega}{k} = v_{co} + \delta_1 h$$

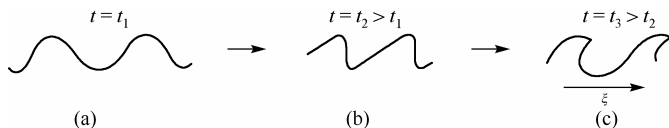


图 6.2 水波接近岸时，形状逐渐从正弦变成三角的尖峰截面

此时 $\delta_1 = \left. \frac{\partial v_c}{\partial h} \right|_{h=h_0}$ ，这里 h_0 是波的平均高度， v_{co} 是波的相速度的线性部分， δ_1 是与非线性效应相关的系数。此式表明非线性相互作用导致了波的形式和速度的变化。这也很类似于色散效应，但后者的机理和变化规律与前者不同。在色散作用中，当色散效应较弱时，其波的相速度可表示成

$$v_c = \frac{\omega}{k} = v'_{co} + \delta_2 k^2 \quad (6.5)$$

式中， v'_{co} 是无色散作用的相速度； $\delta_2 = \left. \frac{\partial^2 v_c}{\partial k^2} \right|_{k=k_0}$ 是波的色散作用的系数。一般来讲，在最低阶色散效应中，其中相速度正比于 k^2 。如果正比于 k ，则称为耗散效应。

为了剖析非线性作用对微观粒子性质的影响，现考察方程

$$\phi_e + \phi\phi_x = 0 \quad (6.6)$$

的简单运动。此时，粒子随时间的演变仅由非线性作用 $\phi\phi_x$ 项决定，此方程无色散效应存在。其解可表示成

$$\phi = \Phi'(x - \phi t) \quad (6.7)$$

图6.3示出了由式(6.6)和式(6.7)得出的，在不同时刻 ϕ 随 x 变化的情况。在此图中的每一点 ϕ 用速度 ϕ 进行传播。于是随时间的增加，波的前端变得越来越陡。由于非线性相互作用的存在，最终变成具有三重值的畸形函数。此现象不会在线性波的传播中出现。从而再次印证了非线性相互作用的效应是直接导致波的畸变。

如果在 $t=0$ 时让 $\phi = \Phi' = \cos \pi x$ ，则在 $x=0.5$ 和 $t=\pi^{-1}$ 时有 $\phi=0$ 和 $\phi_x = \infty$ 。于是此波变得十分陡峭，则就可以 $t=\pi^{-1}$ 作为此波的破坏周期。但是，这种因非线性

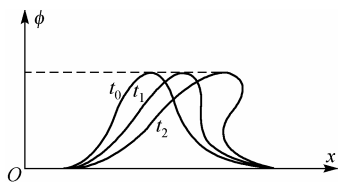


图 6.3 由式(6.6)示出的波的形状

性作用造成的倒塌现象可使波的色散效应受到抑制。这是因为如果在式(6.6)的方程中加上一个色散项的 ϕ_{xxx} ，则它变为我们熟悉的 KdV 方程 $\phi_t + \phi\phi_x + \phi_{xxx} = 0$ 。它具有形式为 $\text{sech}^2(X - vt)$ 的局域孤立波，即孤子解。此时色散的畸变被非线性作用的畸变所抑制。两者的叠加可使波变成一个稳定的孤立波。但若加 ϕ_{xx} ，而不加 ϕ_{xxx} 时，则式(6.6)变成

$$\phi_t + \phi\phi_x = v'\phi_{xx} \quad v' > 0 \quad (6.8)$$

它是 Burgur 方程。此时的 $v'\phi_{xx}$ 不能抑制非线性相互作用的倒塌效应，于是就不会有一个稳定的孤立波的出现，其解是衰减的。事实上，若做 Cole-Hopf 变换

$$\phi = -2v' \frac{d}{dx} (\log \psi') \quad (6.9)$$

则方程式(6.8)变成

$$\frac{\partial \psi'}{\partial t} = v' \frac{\partial^2 \psi'}{\partial x^2} \quad (6.10)$$

这是一个线性的热传导或扩散方程，它具有衰减解。因此 Burgur 方程式(6.8)本质上是一个在黏滞流体中的一维 Navier-Stokes 方程，而不是一个孤子方程。故它仅有衰减解，而无孤子解。

以上这些例子使我们清楚看到了色散作用和非线性相互作用的效应和本质，及它们共同作用的效果。只有它们同时存在，并且共同作用于粒子或波时，才能使它们局域。

从这里得出的色散和非线性作用的机理和效果可以看出，在线性量子力学中的线性 Schrödinger 方程是一个色散方程，它始终只有衰减的或不稳定的色散波动解，于是微观粒子无颗粒特性。相反，在非线性量子力学中的非线性 Schrödinger 方程和非线性 Klein-Gordon 方程由于同时存在色散和非线性作用，故其解或微观粒子总是能够局域，其动力学方程式(3.155)或式(3.2)有稳定的孤子解。这些结果是不以人的意志为转移的客观规律。其原因是由于此时微观粒子受到了一个非线性相互作用的缘故。从式(3.161)可知，此时的有效势是一个双阱势，它提供了两个基态，从而使它局域为一个孤子而处于稳定状态中。从式(3.165)～式(3.171)可知，这个非线性相互作用可通过自相互作用力、自凝聚、自聚焦及自陷等机制产生。下面特别详细分析这些相互作用的特点。

6.2 粒子的自相互作用和固有的非线性特性

在一个由多粒子或多体组成的系统中，粒子之间或粒子与另一物体之间总是存在相互作用，一旦一粒子受外界影响而发生状态变化时，也影响到其他粒子。当其他粒子的运动状态变化时，则此粒子也将受一种相互作用。这种相互作用常称为粒子间的自相互作用。由于现有的量子场理论能很好地描述多粒子之间相互作用的特点，为此，我们转到量子场论中研究这种自相互作用的特点。按照量子场论中两体的相互作用理论，对于两个费米子，这种具有自相互作用体系的相应的哈密顿算符，可用它们的产生和消灭算符表示为

$$H_{\text{int}} = G\psi_p^+\gamma_\mu^+\psi_n\psi_e^+\gamma^\mu\psi_v + \text{c.c.} \quad (6.11)$$

这里波矢算符的下标分别表示了质子、中微子、中子和电子，则 ψ_p^+ 和 ψ_e^+ 分别是质子和电子的产生算符， γ_μ^+ 是 Dirac 度规， G 是这种相互作用的耦合系数，它是一个局域的相互作用。

在费米理论提出之后，Yukawa 便指出在电子和质子之间的相互作用可借助于介子的中间玻色场来传播和调节。这个介子直接和局域地与这两个粒子相互作用，它们之间的相互作用哈密顿算符可表示为

$$H_b = g\psi_p^+\psi_n\phi \quad \text{和} \quad H_e = g\psi_e^+\psi_v\phi \quad (6.12)$$

式中， ϕ 就是介子场； g 是它们之间的耦合常数。在量子场理论中，每个粒子都是用—一个场表示的。于是可以建立一个统一场论来描述粒子的相互作用。为了这个目的，必须引入固有非线性作用和自相互作用。这种思想最早来源于海森堡等人提出的非线性自旋理论。在这个理论中，每个基本场均描述了一个自旋为 1/2 的粒子系统。其玻色子可以采用一个费米子-反费米子对的激发形式出现。此时，相互作用的流密度可写成为

$$J = \eta\psi^+\sigma_v\psi\sigma^v\psi \quad (6.13)$$

式中， η' 是一个耦合常数；而 $\sigma_v = (1, \vec{\sigma})$ ，此处 $\vec{\sigma}$ 是一个泡利矩阵。由于在此时的场方程中仅有一个场量出现，则它称为固有的非线性作用。最近的统一场论方案是统一所有的相互作用，如弱、强和电磁相互作用，以此减少不同场量的数目。这些理论也依赖于固有的非线性相互作用。

从实验得知，介子的自相互作用具有普适性，从实验中观察到一对 π 介子可能形成一个介子，后者又可衰减为一对 pion (介子)。因此，其相互作用能相当于相互作用场理论中粒子的自能。后者在任何相互作用场理论，乃至量子与经典场理论中都存在。

故它是一个固有的持久相互作用。但不在两个点粒子的经典散射中出现。在量子理论中,孤立系统的概念是无意义的。因此,可把粒子的相互作用分成初始无相互作用(自由运动)、相互作用和最后无相互作用(自由运动)的作用过程在量子理论中是不成立的。例如,由 **Daric** 理论描述的电子和一个 **Maxwell** 场的作用总是自始至终存在。由于虚跃迁的存在,对于一个单一电子来讲,它连续地同自身的电磁场经历了多次相互作用,从而使自己感受到自相互作用或持久相互作用的客观存在。这些虚过程的自相互作用的费曼图在图 6.4 中描述。在量子统计物理中,这些过程可用一般的微扰理论来计算。此时,裸电子和自由电磁场都被组合到微扰理论中,前者变成“穿衣服”的电子。于是持久的相互作用使电子变成了一个具有一定质量和电荷的物理粒子。对于用 ϕ 表示的玻色子而言,当概括这个自相互作用后,其场方程变为

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + G(m^2, \alpha_i : \phi) = 0 \quad (6.14)$$

式中, m^2 是粒子的质量; $\alpha_i (i=1,2,\dots,n)$ 是一些耦合常数。式(6.14)是一个玻色场方程。在这些相互作用中,这些过程中的共同成分是它们产生和消灭了一个中间成分。根据这种特点, **Burt** 由此将这种自相互作用分为以下几类。

(1) 自相互作用 $\alpha\phi^4$ 型。这种自相互作用是首先导致了一个质子-反质子对变成一个虚 **pion** 对,随后又形成了一个实的 **pion** 对。相应于这种自相互作用的费曼图示于图 6.5 中。其强子与 **pion** 的相互作用采用式(6.12)描述。

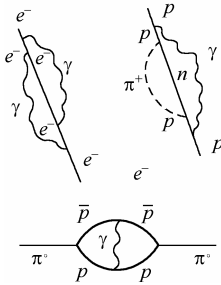


图 6.4 虚过程的自相互作用的费曼图

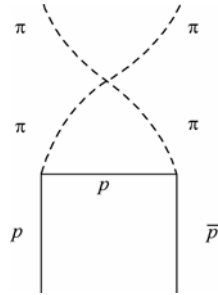


图 6.5 $\lambda\phi^4$ 型自相互作用的费曼图

(2) 自相互作用 $\alpha\phi^5$ 型。这种自相互作用导致了 2π 系统变成 $K^0 - \bar{K}^0$ 系统;后者最后又衰变为 3π 系统。其相应的费曼图如图 6.6 所示。

(3) 多项式流 $J_p(\phi) = \sum \alpha_n \phi^n$ 型自相互作用。此自相互作用导致了高阶复合过程的产生。如果这些 **pion** 同具有低能的核子有一个 **Yukawa** 耦合,则可通过虚核子-反核子态的产生而出现 $\pi - \pi$ 相互作用。在这个过程中会出现一个散射振幅,其最低阶可表示成

$$M(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{q}_1, \hat{q}_2) = -g^4 \int \frac{d^4 k}{(\pi\alpha)^2} \times$$

$$\frac{Tr[\gamma_s(k + \phi_1 + m)\gamma_s(k - \phi_1 + m)\gamma_s(k - \phi_1 - \phi_2 + m)\gamma_s(k + m)]}{d(\hat{k} - \hat{p}_1)d(\hat{k} - \hat{q}_1)d(\hat{k} - \hat{q}_1 - \hat{q}_2)d(\hat{k})} = -g^4 \int \frac{d^4 k}{|\hat{k}|^4} \quad (6.15)$$

如图 6.7 所示。如果相互作用的哈密顿量是 $H_{\pi\pi} = ig\psi^+ \gamma_s \psi \phi + \text{c.c.}$ 。则上式中的 $d(\vec{k})$ 为

$$d(\hat{k}) = \hat{k}^2 - m^2 + i\varepsilon \quad (6.16)$$

由于在式 (6.16) 中的相互作用能延伸过整个动量空间，则其矩阵元是有限的。但是 Yukawa 耦合作用是用 $H_{\pi\pi} = \alpha\phi^4$ 型的自相互作用伴随。如果这里的 α 值能够抵消式 (6.15) 中的无限大部分，则这两个相互作用会导致微扰理论的一个有限结果。

(4) 由超越流 (transcendental current)

$$J_{\text{SG}} = \frac{m^2}{g} \sin(g\phi) \quad (6.17)$$

和一个配给流 (rational current)

$$J_r = \sigma\phi^{2p+1} + \beta\phi^{p+1} + \gamma\phi^{-p+1} + \delta\phi^{-2p+1} \quad (6.18)$$

组成的自相互作用。它经常用来讨论非线性微扰质量的产生和非色散波解。

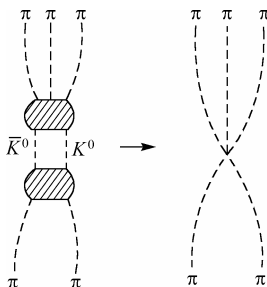


图 6.6 通过 $\bar{K}^0 - K^0$ 中间态使 2π 系统相关 3π 系统的自相互作用费曼图

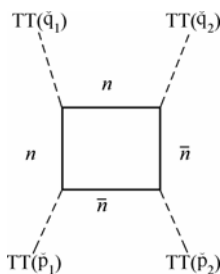


图 6.7 耦合于中子的 pion 在最低阶微扰近似下的自相互作用费曼图

这些多项式、超越的和配给流等三种流可推广到孤立波理论中，每一类都有其自身的特点，并有不同的应用。

对于一个玻色场，当自相互作用被考虑时，具有非线性相互作用式 (6.14) 的场方程应当具有如

$$\partial_\mu \partial^\mu \phi + m^2 \phi + J(\alpha, \phi) = 0 \quad (6.19)$$

的形式，这里 J 就是上述的自相互作用流矢量。如果 $J = 0$ 时，不是包含有产生就是包含有消失算符的上述场方程的解描述了这个场的量子的运动。为了寻找式 (6.19) 的解，

这里研究持久自相互作用的特点。很明显,式(6.19)就是非线性量子力学中相对论情况下的 ϕ^4 场方程或 Sine-Gordon 方程式(3.4)~式(3.5),它描述了一个微观粒子的相对论运动。Burt 指出,它的解具有以下特点,即(i) $\phi = \phi_k^{(\pm)}(\vec{x}) = f(A_k^{(\pm)} e^{\pm i\vec{k}\cdot\vec{x}})$; (ii) 在所有时间内, $\phi_k^{(\pm)}$ 仅包含了一个耦合常数; (iii) $\phi_k^{(\pm)}$ 是无微扰解。因此,此场方程的解是非线性量子场中的波动方程的一个特例。Whitham 证明了该场方程的解能以常速度无色散地传播。

如果让式(6.19)取成

$$J_p = \alpha' \phi^{2p+1} + \alpha \phi^{4p+1} \quad (6.20)$$

的形式,则 Burt 得到其解为

$$\phi_k^{(\pm)}(\hat{x}) = U_k^{(\pm)}(\hat{x}) \left\{ \left[1 - \frac{\alpha' U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{2p}}{4(1+p)m^2} \right]^2 - \frac{\alpha U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{4p}}{4(1+2p)m^2} \right\}^{-1/2p} \quad (6.21)$$

式中, $p \neq 0, -1/2, -1$; $U_k^{(\pm)}(\hat{x}) = A_k^{(\pm)} e^{\pm i\vec{k}\cdot\hat{x}} (D\omega V)^{-1/2}$; $\omega = \sqrt{k^2 + m^2}$; D 是一个任意常数; V 是系统的体积; $A_k^{(\pm)}$ 是一个系数。解式(6.21)具有上述前两个特性,其指数是纯振动的。所以,粒子场满足非线性场方程。如 $\alpha = \alpha' = 0$, 则此场方程退化为自由场方程的解 $U_k^{(\pm)}(\hat{x})$ 。为了使这个持久相互作用场是非微扰色散场,则必须把 $\phi_k^{(\pm)}(\hat{x})$ 写成 $U_k^{(\pm)}(\hat{x})$ 的正项级数。为做到这一点, Burt 使用了 Genenbauer 多项式的推广函数

$$(1 - 2\omega Z + Z^2)^{-1/(2p)} = \sum_n C_n^{1/(2p)}(\omega) Z^n \quad (6.22)$$

这里 C_n^m 是一个 Genenbauer 多项式。如果让

$$\omega = \frac{\alpha'}{4(1+p)m^2 b'}, \quad Z = b' U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{2p}, \quad b' = \left\{ \left[\frac{\alpha''}{4(1+p)m^2} \right]^2 - \frac{\alpha'}{4(1+2p)m^2} \right\}^{1/2}$$

则可得到

$$\phi_k^{(\pm)}(\hat{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n^{1/(2p)}(\omega) b'^n U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{2pn+1} \quad (6.23)$$

因此非线性场方程的算符解可以表示为一个产生或消灭算符的正项级数,用这个展开式可证明这个场方程的解是非微扰的。实际上,如果选择新解

$$\phi_k^{(\pm)}(\hat{x}) = \frac{1}{(b')^{(2p)}} U_k^{(\pm)}(\hat{x}) \left\{ 1 - \frac{\alpha' U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{2p}}{4(1+p)m^2 b'} + U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{4p} \right\}^{-1/(2p)} \quad (6.24)$$

则在 $\alpha' \rightarrow 0$ 和 $\alpha \rightarrow 0$ 时可求出具有有限阶的解。在 $\alpha' = 0$ 时,则它有

$$\phi_k^{(\pm)}(\hat{x}) = \frac{U_k^{(\pm)}(\hat{x})}{\left\{b' \left[1 + U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{4p}\right]\right\}^{1/(2p)}} \quad (6.25)$$

式中,

$$b' = \sqrt{-\frac{\alpha}{4(2p+1)m^2}}$$

如果 $\alpha' \neq 0$ 和 $\alpha = 0$, 则为

$$\phi_k^{(\pm)}(\hat{x}) = \frac{1}{b'^{1/(2p)}} \frac{U_k^{(\pm)}(\hat{x})}{\left[1 - U_k^{(\pm)}(\hat{x})^{2p}\right]^{1/p}} \quad (6.26)$$

式中,

$$b' = \frac{1}{(p+1)m^2}$$

在第一种情况下, 其解在 $\alpha = 0$ 时是奇异的。在小 α' 时, 其修正项正比于 α'^2/α 。在第二种情况下, 其解在 $\alpha' = 0$ 时是奇异的, 在小 α 时其修正项正比于 α/α'^2 。这些解不能使用微扰法得到。这是由于系统存在固有非线性相互作用的缘故, 即它是由非线性流的自相互作用产生的。

这些固有非线性相互作用会使微观粒子具有一些经典粒子的特性。这种固有的非线性场不是一个量子场的微扰, 也不可能是线性量子场解的叠加结果。以上的自相互作用理论可以推广到非相对论时的多粒子相互作用系统中, 对于形式如 ϕ^4 的自相互作用体系, 对应的粒子系统的动力学方程正好就是非线性 Schrödinger 方程, 它的一些特点已得到广泛研究。

6.3 由无惯性自相互作用导致的微观粒子的自局域

以上是用量子场理论的方法讨论了由粒子的自相互作用导致的固有的非线性相互作用。这种粒子的自相互作用也常出现在多粒子的凝聚态物质中, 例如准一维金属导体、金属-有机复合物和有机盐中。这种思想最早是由 Frohlich 在讨论超导性机理时提出的。他认为通过电-声子相互作用, 使电子之间产生自相互作用, 以使物体变成超导性。Frohlich 还指出, 当电子限制在一维金属链中时, 由于电荷密度波 (CDW) 的形成也可以降低金属中电子的能量, 此时其系统的费米面由两个平行的平面组成。事实上, 在金属中由于粒子电荷密度的变动 (jellium 模型) 导致了电子同正弦势的相互作用, 从而引起了电子能量谱中能隙的产生和无衰减的电子密度的周期性 CDW 的形成。这个无衰减的 CDW 就是一个孤子。在一维导体中, 这个孤子就是具有自相互作用的电子的自局域机制形成的。Davydov 和 Pestryakov 研究过具有无惯性自相互作用的无自旋电子复数量场的非线性自局域效应的特点。在一维无限空间中, 他们把具有自相

相互作用的标量场的哈密顿量密度表示成

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|^2 \mp b |\phi|^4 \quad (6.27)$$

这里 b 是与速度无关的非线性作用系数，其中的“-”和“+”分别表示吸引和排斥的相互作用。这种相互作用可以通过在微观粒子之间的局域相互作用或通过电子和另一些电子的无惯性位移场之间的局域相互作用来实现。此模型类似于 6.2 节中讨论的 $\lambda\phi^4$ 型的自相互作用模型。

如果自相互作用缺乏，即 $b=0$ ，则场量 $\phi(x,t)$ 描述了具有质量为 m 的无相互作用的粒子的状态。它的解是一个平面波。在 $b \neq 0$ 时，其电子的运动方程就是外势场为零的非线性 Schrödinger 方程

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \mp 2b |\phi|^2 \right) \phi = 0 \quad (6.28)$$

在周期性边界条件 $\phi(x,t) = \phi(x+r_0L,t)$ 和归一化条件 $\int_0^L |\phi(x,t)|^2 dx = 1$ 下，他们把以上方程的解写成

$$\phi(x,t) = \frac{1}{r_0} \varphi(\xi) \exp \left\{ i \left[kx - \left(\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) t + \theta \right] \right\} \quad (6.29)$$

式中， ξ 是在以速度 $v = \hbar k/m$ 运动的参考系 $\xi = \frac{1}{r_0}(x - x_0 - vt)$ 中的无量纲坐标； $\hbar\omega$ 是相对于这个参考系的电子的能量； θ 是任意相位； r_0 是系统的长度单位，并有 $r_0 = \hbar/\sqrt{4mb}$ 。其周期性的边界条件导致了粒子的波矢 k 和 v 的量子化，并可表示为 $k = \frac{2\pi n}{r_0L}$ ($n=0, \pm 1, \pm 2, \dots$)。将式 (6.29) 代入式 (6.28)，可求得

$$\left[\frac{d^2}{d\xi^2} + \varepsilon + \varphi^2(\xi) \right] \varphi = 0 \quad (6.30)$$

这里 $\varepsilon = \hbar\omega/\varepsilon_0$ ， $\varepsilon_0 = 2b$ 。于是相应的场激发态的能量 E 和动量 P 分别为

$$E(v) = \frac{1}{2}mv^2 + \varepsilon_0 \int_0^L \left[\left(\frac{d\varphi}{d\xi} \right)^2 \mp \frac{1}{2}\varphi^4 \right] d\xi$$

$$P(v) = mv \int_0^L \varphi^2(\xi) d\xi = mv$$

由于 v 是量子化的，则粒子的动量也是量子化的。如果用 $\varphi(\xi)$ 左乘式 (6.30)，并从 0

到 L 积分, 可得

$$\varepsilon = \int_0^{+\infty} \left[\left(\frac{d\varphi}{d\xi} \right)^2 \mp \varphi^4 \right] d\xi$$

则粒子的能量为
$$E(v) = \frac{1}{2}mv^2 + \varepsilon_0 \left[\varepsilon + \frac{1}{2} \int_0^L \varphi^4(\xi) d\xi \right]$$

在吸引非线性相互作用势时, 如果让 $\varepsilon = a^2(2 - k^2)$ 和 $A = 2a^2$, 这里 A 和 a 是由上述周期边界和归一化条件决定的, 则 Davydov 等人求得 $\varphi_a(\xi, k) = A \operatorname{dn}(a\xi, k)$ 和

$$E_a(v, k) = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{\varepsilon_0^0}{16E(k)} \left[2 - k^2 - \frac{Q_a(k)}{E(k)} \right] \quad (6.31)$$

其中, $Q_a(k) = \frac{1}{3} [2(2 - k^2)E(k) - (1 - k^2)K(k)]$, $\operatorname{dn}(u, k)$, $K(k)$ 和 $E(k)$ 分别是雅可比椭圆函数、第一类和第二类完全椭圆积分。当 $k_1^2 = 1 - k^2 \rightarrow 0$, 即 $k_1^2 \rightarrow 0$ 时, 在一个无穷系统中有 $\varphi_a(\xi, k) \approx 2 - 3/2 \operatorname{sech}(\xi/4)$, $E_a \approx mv^2/2 - \varepsilon_0/48$ 。当 $k_1^2 \rightarrow 1$ 时, 则有 $E_a(v, n) = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{2mb}{\pi^2 \hbar} \left(1 - \frac{1}{2}k^2 \right)$ 。此粒子的能量是量子化的。

在排斥非线性相互作用和周期性边界条件下, 当 $k^2 \ll 1$, $u = \xi/(2\pi)$ 和 $|\xi| \ll L$ 时, 可得

$$\varphi_r = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left\{ \sin(u) + \frac{1}{4}k^2 \cos(u) [\sin(u) \cos(u) - u] \right\}$$

$$E_r(v, k) = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{mb^2}{8\pi^2} (1 + k^2)$$

因此, 粒子的能量也是量子化的。

6.4 介质场的非线性特征和波的自聚性机制

6.4.1 介质的色散和非线性特征

由大量原子和分子组成的物理系统或物质, 有时具有明显的各向异性的结构特性。在此系统或物质中的微观粒子可“感受”到由介质提供的一个非线性相互作用。由于微观粒子具有波动性, 则介质场的非线性作用可使具有波动的微观粒子“自聚焦”为一个局域状态。此情况很类似于光波在具有 Kerr 效应的各向异性光纤中的传播特性。Hasegawa 等人发现由于光纤的 Kerr 效应, 使光波聚焦成一个光孤子而被局域化。现在按照这种思想来研究微观粒子在这种各向异性材料中的自聚焦效应。

一般来讲, 介质对波的折射系数 n 被定义为波在真空中传播的速度 c 与在介质中

的传播速度 v_0 的比值, 即 $n = c/v_0 = ck/\omega$ 。因此, 在电介质中折射系数相关于波的频率, 从而出现色散效应。如前所述, 其波矢 k 和频率 ω 的关系叫做色散关系。因此在色散介质中, $\partial n/\partial \omega$ 和 $\partial n^2/\partial \omega^2$ 等总是不等于零。根据式(6.2), 于是可把介质中载波的频率 ω 展开成为波矢的如下级数:

$$\omega - \omega_0 = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2!} \left. \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2 + \frac{1}{3!} \left. \frac{\partial^3 \omega}{\partial k^3} \right|_{k_0} (k - k_0)^3 + \dots \quad (6.32)$$

此式表明, 调制波的频率因其波矢 k 变化即偏离载波的波矢 k_0 而发生的变化。

对于微观粒子的包络波函数 $\varphi(x, t)$ (在光纤中它相当于光波的电场强度) 是 x 和 t 的一个缓慢变化的函数, 因此可进行傅里叶函数变换。通过这种变换, 波函数 $\varphi(x, t)$ 可变换为变量 $\Delta k (= k - k_0)$ 和 $\Delta \omega (= \omega - \omega_0)$ 的函数, 后者分别相应于载波波矢 k_0 和频率 ω_0 的小移动。它们的傅里叶变换关系可表示成

$$\bar{\varphi}(\Delta k, \Delta \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(x', t') e^{i(\Delta k x' - \Delta \omega t')} dt' dx' \quad (6.33)$$

这里 $x' = x\sqrt{2m/\hbar}$, $t' = t/\hbar$ 。其反变换为

$$\varphi(x', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\varphi}(\Delta k, \Delta \omega) e^{-i(\Delta k x' - \Delta \omega t')} d(\Delta k) d(\Delta \omega)$$

从式(6.32)和式(6.33)可知, $\partial \varphi/\partial t'$ 和 $\partial \varphi/\partial x'$ 分别等值于 $i\Delta \omega \bar{\varphi}$ 和 $-i\Delta k \bar{\varphi}$ 的傅里叶变换。利用这个关系, 可得到 $\Delta \omega$ 和 Δk 分别可用 $-i\partial/\partial t'$ 和 $i\partial/\partial x'$ 代替。利用这些算符, 可把方程式(6.32)变成

$$-i \frac{\partial}{\partial t'} = i\omega' \frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\omega''}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} - \frac{\omega'''}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x'^3} + \dots \quad (6.34)$$

这里 $\omega' = \frac{\partial \omega}{\partial t}$, $\omega'' = \frac{\partial^2 \omega}{\partial k^2}$, 等等。用包络波 $\varphi(x', t')$ 右乘式(6.34), 仅保留二阶导数项, 则式(6.34)可写成

$$i \left(\frac{\partial}{\partial t'} + \omega' \frac{\partial}{\partial x'} \right) \varphi - \frac{\omega''}{2!} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} = 0 \quad (6.35)$$

则调制包络波的群速度可定义为

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \omega', \quad \omega'' = \frac{\partial v_g}{\partial k}$$

这表明 ω'' 是由包络波的群速度对波矢的导数来决定的。则 ω'' 就表示了包络波的群速度色散特性。如果 $\omega'' = 0$ ，则方程式 (6.35) 的解可用 $x' - v_g t'$ 的任意函数 $\varphi(x' - v_g t')$ 来表示。于是微观粒子的包络波是以群速度传播的，则现引入以群速度运动的新坐标系。在此坐标系中，其坐标变量为 $\tau = \varepsilon^2 t'$ ， $\xi = \varepsilon(x' - \omega' t')$ ，于是式 (6.35) 可写成

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} - \frac{\omega''}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi^2} = 0 \quad (6.36)$$

这里 ε 是一个小数， $\varepsilon = \Delta k_0 / k_0$ 表示了谱的宽度。方程式 (6.36) 是一个色散方程。其色散关系就是式 (6.32)。它表示了微观粒子的包络波由于在此时的群速度色散而在传播中被畸变。如果具有短波长的微观粒子在介质中传播时， $\partial^2 \varphi / \partial x'^2$ 可以变得很大，这是因为它反比于微观粒子(脉冲)的宽度。于是在传播过程中微观粒子会发生变形。在介质的横截面大小近似于微观粒子的波长的介质中，其群速度的色散项 ω'' 便由介质本身的特性决定。对于较短的波长， ω'' 是正的，即群速度随波矢的增加而增大。但对于长波长的微观粒子， ω'' 是负的，其群速度随着波矢的增加而减小，则相应于 ω'' 为负值的波长区叫做正常色散区。相反，在相应于 ω'' 为正值的波长区叫做反常色散区。如果选择介质的色散损失最小的波长区，则群速度的色散 ω'' 可能取正值。在此情况下，因群速度色散变化，则微观粒子的形状将发生重大变化。这就是线性色散介质的基本特性。

6.4.2 非线性 Schrödinger 方程的建立

但是，对于一些非线性介质如光纤，情况就不一样了。除了存在介质的色散效应外，在其中还会出现非线性相互作用。如前所述，它也可以改变粒子的特性。Kerr 发现，此时介质的折射系数随粒子的强度即 $\varphi(x, t)$ (在光纤中为电场强度) 的平方的增加而增加。此现象就称为 Kerr 效应。这个效应可用 $n = n_0 + n_2 |\varphi|^2$ (在光纤中为 $n_0 + n_2 E^2$) 来表示，其中 n_2 叫做 Kerr 系数。由于 n_2 是 $\varphi(x, t)$ 的非线性函数，所以此效应是一个非线性效应。在玻璃光纤中， n_2 大约为 $1.2 \times 10^{-22} \text{ m}^2/\text{V}^2$ 。由于这个效应的存在，微观粒子在介质中发生的频率变化可用 $-n_2 |\varphi|^2 ck / (nn_0) = -n_2 |\varphi|^2 \omega / n_0$ 来表示，则当微观粒子在介质中传播时，它将感受到这个效应的作用。于是应当把它加到微观粒子的运动方程式 (6.36) 中，则后者变为

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial t'} - \frac{\omega''}{2!} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x'^2} + b |\varphi|^2 \varphi = 0 \quad (6.37)$$

这里 $b = \frac{n_2 \rho' \omega}{n_0 \varepsilon^2}$ ，其中 ρ' 是一个约化因子，它表征了粒子的波函数在横截面上的变化，

一般取为 $1/2$ 。显然，式 (6.37) 就是微观粒子在具有非线性作用如 **Kerr** 效应的介质中运动时的动力学方程。则它是一个非线性 **Schrödinger** 方程。所具有的非线性相互作用来源于粒子与具有非线性 (如 **Kerr**) 效应的介质的相互作用。这种非线性作用使具有波动性的微观粒子自聚焦为局域的孤立波。

6.4.3 微观粒子局域的自聚焦机制

为了进一步澄清粒子局域的这种机理，现用 **Sulem** 的方法来推导在这类介质中传播的微观粒子的动力学方程。如所知，在线性量子力学中，线性动力学方程常用包含 ∂_t 和 ∇ 等算符的线性算符方程 $\hat{L}(\partial_t, \nabla)\Phi = 0$ 表示；则此方程具有近似单色波解为

$$\Phi = \varepsilon \varphi e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x}' - \omega t')}$$

其振幅 φ 为常数，其频率 $\omega(k)$ 和波矢是满足色散关系 $L(-i\omega, i\mathbf{k}) = 0$ 的实数物理量。

为了阐明在非线性系统中倍增非线性效应或正则共振特征 (它使微观粒子长时间和长距离传播) 产生的原因，我们把上述线性色散关系写成 $\omega = \omega(k)$ 或 $L(-i\omega, i\mathbf{k}) = 0$ 。为了理解由微观粒子 (或波) 的长时间和长距离传播引起的非线性相互作用的积累效应或正则共振特性，现在我们重写线性色散关系为

$$[i\partial_{t'} - \omega(-i\partial_{\vec{x}'})]\varphi e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x}' - \omega t')} = 0 \quad (6.38)$$

这里 $\partial_{\vec{x}'}$ 和 $\omega(-i\partial_{\vec{x}'})$ 是一些微分算符。它是用 $-i\partial_{\vec{x}'}$ 代替 k 后从 $\omega(\vec{k})$ 中得到的。

在弱非线性介质中，存在着对有限振幅的波的绝热响应。则非线性特性可影响载波的色散关系。于是微观粒子的频率依赖于它的强度，这就导致了可用函数 $\Omega(\vec{k}, \varepsilon^2 |\varphi|^2)$ 代替它的频率，这里 $\Omega(\vec{k}, 0) = \omega(\vec{k})$ 。这个效应叫做自聚焦效应。则一个具有复数波振幅 φ 的微观粒子不再是一个振幅为常数的平面波，而是一个具有调制特性的缓慢变化的波，后者依赖于缓慢变化的变量 $X = \varepsilon x'$ 和 $T = \varepsilon t'$ ，这里 ε 是一个小参量。则在式 (6.38) 中的导数可以分别用 $\partial_{t'} + \varepsilon \partial_T$ 和 $\partial_{\vec{x}'} + \varepsilon \nabla$ 代替，这里 ∇ 表示相对于缓慢变化变量 X 的导数。于是式 (6.38) 变成

$$\left[i\partial_{t'} + i\varepsilon \partial_T - \Omega(-i\partial_{\vec{x}'} - i\varepsilon \nabla, \varepsilon^2 |\varphi|^2) \right] \varphi e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x}' - \omega t')} = 0$$

此时，便存在一个弱的非线性色散关系

$$\left[\omega + i\varepsilon \partial_T - \Omega \left(\vec{k} - i\varepsilon \nabla, \varepsilon^2 |\varphi|^2 \right) \right] = 0$$

将上式中的各个量展开成 ε 的级数, 在仅留它的二次方项时, 可得到

$$i(\partial_T + \vec{v}_g \cdot \nabla) \varphi + \varepsilon [\nabla \cdot \nabla \varphi + b |\varphi|^2 \varphi] = 0 \quad (6.39)$$

这里 $\vec{v}_g = \nabla_k \omega$ 是群速度, 其耦合系数 b 是相关于微观粒子的非线性作用强度系数, 并可用在 $|\varphi|^2 = 0$ 时的 $\partial \Omega / \partial (|\varphi|^2)$ 的值来表示。如果把式 (6.39) 看成一个在时间上的初始值问题, 则它可以在 $\vec{\xi} = \vec{X} - T \vec{v}_g$ 的运动参数坐标系下重新表示出来。如果重新标度其时间为 $\tau = \varepsilon T$, 则式 (6.39) 就变成了一个标准的非线性 Schrödinger 方程

$$i \frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \nabla^2 \varphi + b |\varphi|^2 \varphi = 0$$

从这一推导过程使我们明确其非线性相互作用来源于具有波动性的微观粒子的自聚焦过程。

6.5 粒子局域的自陷机制

6.5.1 有机分子中的激子激发

我们十分感兴趣的是在一维分子系统中的集体激发。在这个系统中由于内部激发或额外电子形成的激子可通过与晶格的作用而被自陷为一个局域的孤子。这个概念首先由 Davydov 和其合作者提出。类似于这些一维系统的有生物中的蛋白质和有机分子晶体乙酰苯胺 (ACN)。在这些系统中肽群或氨基酸分子中有 4 个原子 (NHOC) 通过共价键结合而成, 并沿着分子链的方向按照 $\cdots \text{H}-\text{N}-\text{C}=\text{O} \cdots \text{H}-\text{N}-\text{C}=\text{O} \cdots \text{H}-\text{N}-\text{C}=\text{O} \cdots$ 的形式有规律地排列。在两相邻肽群之间通过氢键连接成一链。在乙酰苯胺中有两条这样的链“跑遍”整个晶体。在 α 螺旋蛋白质分子中存在三条这样的长链。在这种长的氢键链中, $\text{O} \cdots \text{H}-\text{X}$ 是一个氢键, 其中 X 表示 $\text{N}-\text{C}=\text{O}$, 它是一个肽群, $\text{C}=\text{O}$ 称为酰胺键 (amide)。在此系统中的集体激发不同于量子力学中的元激发。其内部激发包含了一个 amide-I 的振动激发, 其振动量子具有 0.205 eV 的能量和 0.3 Debye 的电偶极矩, 后者的方向沿分子链。Davydov 称这种分子内部激发为激子。

现在考虑一个质量为 M 的弱束缚肽群或氨基酸分子组成的一个无限链, 在其中的相邻肽群之间的间距为 r_0 。在此链中产生的激子用能量 ε_0 和电偶极矩 \vec{d} 来标志。当这些肽群被激发时, 由于相邻肽群之间存在偶极-偶极矩相互作用, 则该激子受到的力和具有的能量发生改变。从而导致了相邻分子之间的平衡距离改变。如果这些

肽群是周期性和等距离分布的，则在它们之间会产生共振相互作用。从而引起这个激发能量沿分子链的传递。在这种情况下，具有能量为 ε_0 的激子子系统的哈密顿量，

Davydov 将它表示成

$$H_{\text{ex}} = \sum_n \left[(\varepsilon_0 - D) B_n^+ B_n - J(B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n) \right] \quad (6.40)$$

式中， $\varepsilon_0 = 0.205 \text{ eV}$ ； $B_n^+ (B_n)$ 是在第 n 位的激子的产生(消灭)算符，它们的对易关系为

$$[B_n, B_m^+] = \delta_{nm}, \quad [B_n, B_m] = 0$$

在式(6.40)中的 $J = 2\bar{d}^2/r_0^3$ 是共振(或偶极-偶极)相互作用，它决定了激子从一个肽群到另一个肽群的跃迁， D 是由链的畸变所导致的对激子的激发能，并近似为一个常数。对于在这个系统中的激子的集体激发状态，Davydov 用波函数

$$|\Psi\rangle = \sum_n \psi_n(t) B_n^+ |0\rangle_{\text{ex}} \quad (6.41)$$

来表示，其中 $|0\rangle_{\text{ex}}$ 是激子的基态，系数 $\psi_n(t)$ 则满足归一化条件： $\sum_n |\psi_n(t)|^2 = 1$ 。假设波函数 $|\Psi\rangle$ 满足 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad (6.42)$$

由式(6.40)和式(6.42)可得

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = [(\varepsilon_0 - D)\psi_n] - J(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) \quad (6.43)$$

在连续性近似 $\psi_n(t) = \psi(x, t)$ ， $\psi_{n\pm 1}(t) = \psi(x, t) \pm r_0 \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{1}{2!} r_0^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$

下，可得激子的动力学方程为

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = (\varepsilon_0 - D - 2J)\psi(x, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} \quad (6.44)$$

这里 $m = \hbar^2/2Jr_0^2$ 是激子的有效质量。式(6.44)表明，在此情况下激子的运动满足线性 Schrödinger 方程，它和电子等其他元激发一样满足相同的动力学方程。现做变换

$$B_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k A_k e^{iknr_0}, \quad A_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k B_k e^{-iknr_0} \quad (6.45)$$

其共振周期性边界条件要求 $k = \frac{2\pi}{r_0} m (m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots)$ 。将式(6.45)代入式(6.40)可得

$$H_{\text{ex}} = \sum_{\kappa} E(k) A_{\kappa}^+ A_{\kappa} \quad (6.46)$$

这里 $E(k) = \varepsilon - D - 2J \cos \kappa r_0$ 是激子的能量，它的波函数为

$$\psi_k(x, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i[knr_0 - \omega(k)t]} \psi'(x - nr_0) \quad (6.47)$$

其中 $\hbar\omega(k) = E(k)$ ，而 $\psi'(x - nr_0)$ 是在第 n 位的激子的振幅。方程式 (6.47) 表明一旦激子形成，这种激发不是局域于一个分子上，而是在分子链中的所有部分都被激发，从而形成一个线性波的传递。因此，式 (6.47) 表示了一个扩展态或集体激发态。方程式 (6.47) 也可以写成

$$\psi_k(x, t) = A(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} \quad (6.48)$$

这里 $A(k) = \sum_n e^{ik(nr_0 - x)} \psi'(x - nr_0)$ 。这表明激子以波长为 $\lambda = 2\pi/k$ 的平面波运动，但其振幅是被调制。当它的波长大于分子之间的间隙，即 $\kappa r_0 \ll 1$ 时，激子的能量为

$$E(k) = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (6.49)$$

这里 $E_0 = \varepsilon - D - 2J$ 。因此，其中能谱是连续的。在此情况下，激发能均匀地分布于分子链上。但局域于链上一小段 l_0 的激发是不稳定的，此时的激子用一个波包表示。如前所述，这个波包是不稳定的，在传播时间 $t > ml_0/k$ 时会倒塌。因此，在分子链中激发的激子是不稳定的。

6.5.2 非线性激发的产生

但是，由于此激子是肽群中的 amide-I 或 C=O 键的伸缩振动产生的，则它是肽群中的内部激发。于是它的运动和衰减必然导致肽群的状态和特性的变化。如果考虑这个效应和肽群的低频声学振动，并假设肽群的位移用 u_n 来表示，则肽群的振动哈密顿和肽群的位移与这些激子之间的相互作用哈密顿量就可表示成

$$H_{\text{ph}} = \sum_n \left[\frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} W(u_n - u_{n-1}) \right] \quad (6.50)$$

$$H_{\text{int}} = \sum_n \chi(u_{n+1} - u_{n-1}) B_n^+ B_n \quad (6.51)$$

式中， M 是肽群的质量； W 是分子链的弹性系数； P_n 是 u_n 的共轭动量； $\chi = \partial \varepsilon_0 / \partial u_n$ 是这两个运动模的耦合常数。在这种情况下，整个系统的哈密顿量应为

$$H = H_{\text{ex}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}} \quad (6.52)$$

同时, Davydov 用以下波函数表示了这个具有耦合作用的系统中的集体激发状态

$$|\Phi(t)\rangle = |D_2\rangle = \sum_n \phi_n(t) B_n^+ |0\rangle_{\text{ex}} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) u_n]\right\} |0\rangle_{\text{ph}} \quad (6.53)$$

式中, $|0\rangle_{\text{ph}}$ 是声子的基态。使用变分原理, 从式(6.42)和函数 $\langle\Phi(t)|H|\Phi(t)\rangle$ 可求得

$$i\hbar \frac{\partial \phi_n}{\partial t} = [\varepsilon_0 - D + w + \chi(\beta_{n+1} - \beta_{n-1})] \phi_n - J(\phi_{n+1} + \phi_{n-1}) \quad (6.54)$$

$$\frac{\partial^2 \beta^2}{\partial t^2} + \frac{W}{M} (2\beta_n - \beta_{n-1} - \beta_{n+1}) = \frac{\chi}{M} (|\phi_{n+1}|^2 - |\phi_{n-1}|^2) \quad (6.55)$$

式中,

$$\beta_n(t) = \langle\Phi(t)|u_n|\Phi(t)\rangle, \quad \pi_n = \langle\Phi(t)|p_n|\Phi(t)\rangle = M \frac{\partial \beta_n}{\partial t}$$

$$w(t) = \frac{1}{2} \sum_n \left[M \left(\frac{\partial \beta_n}{\partial t} \right)^2 + W(\beta_n - \beta_{n-1})^2 \right]$$

在连续性近似下, 式(6.53)和式(6.54)可变为

$$\left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - A + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - 2\chi \frac{\partial \beta(x,t)}{\partial x} \right] \phi(x,t) = 0 \quad (6.56)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \beta(x,t) - \frac{2\chi r_0}{M} \frac{\partial}{\partial x} |\phi(x,t)|^2 = 0 \quad (6.57)$$

式中, $\frac{\hbar^2}{2m} = Jr_0^2$; $A = \varepsilon_0 - 2J - D + w$; $v_0 = r_0 \sqrt{W/M}$ 是分子链的声速。现在让 $\xi = x - x_0 - vt$, $G = 4\chi^2 / [W(1-s^2)]$, $s = v/v_0$, $\mu = G/4J$, 则从式(6.56)和式(6.57)可得

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} - A\phi + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + G|\phi|^2 \phi = 0 \quad (6.58)$$

$$\frac{\partial \beta(x,t)}{\partial x} = -\frac{2\chi r_0 |\phi(x,t)|^2}{W(1-s^2)} \quad (6.59)$$

方程式(6.58)刚好与式(3.2)的非线性 Schrödinger 方程式一致, 它的解可写成

$$\phi(x,t) = \sqrt{\frac{\mu}{2}} \text{sech} \left[\frac{\mu}{r_0} (x - x_0 - vt) \right] \exp \left\{ \frac{\hbar v}{2Jr_0^2} (x - x_0) - \frac{Et}{\hbar} \right\} \quad (6.60)$$

$$\beta(x,t) = -\frac{\chi r_0^2}{W(1-s^2)} \tanh \left[\frac{\mu}{r_0} (x - x_0 - vt) \right] \quad (6.61)$$

它们是一些局域的孤子，即在式(6.58)中的非线性相互作用 $G|\phi|^2\phi$ 的作用下，原来扩散的激子现在变成一个局域的孤子。这时，此孤子的能量为

$$E = E_0 + \frac{1}{2}m_{\text{sol}}v^2 \quad (6.62)$$

式中， v 是孤子的速度； E_0 是孤子的静止能量。它为

$$E_0 = \varepsilon_0 - 2J - D - \frac{\chi^2}{3W^2J} < E_{\text{ex}} = \varepsilon_0 + 2J - D \quad (6.63)$$

和

$$m_{\text{sol}} = m + \frac{4\chi^2(1+3s^2/2-s^4/2)}{3W^2Jv_0^2(1-s^2)^3} > m$$

方程式(6.63)表明孤子的能量低于式(6.49)给出的激子的能量，大约为 $E_B = -\chi^4/3W^2J$ ，这刚好是孤子的束缚能。很明显，它随激子与肽群振动之间的耦合系数的增加而增大。因此孤子或者说此时的微观粒子不但是稳定的，同时也是局域的。其局域的原因是由于激子与肽群位移之间的耦合相互作用产生的非线性相互作用 $G|\phi|^2\phi$ 所引起的。这种非线性相互作用一方面因肽群的位移而发生畸变，这一畸变又为激子提供了一个势阱，从而使激子的能量降低而发生自陷效应。所降低的能量值为 $-\chi^4/3W^2J = \frac{(1-s^2)G}{12WJ}$ ，它直接正比于非线性相互作用系数 G 。故这种非线性相互作用产生的机理称为自陷，这和式(3.165)或式(3.168)中描述的自陷机制是一致的。在这种非线性相互作用机制中我们未冻结肽群晶格的运动，而是充分考虑它自身的固有运动和它与激子之间的耦合作用[如式(6.55)或式(6.57)所示]。因此，非线性相互作用出现，激子被局域，即通过这种自陷机制，具有波动性的激子自局域为一个孤子。此概念最早是 Landan 在研究晶格中电子的运动时提出的。他暗示局域电子可能极化晶体，后者又反过来降低了电子的能量。Landan 的这个概念后来被 Pekar, Frohlich 及 Holstein 等人所发展，它包含有在等离子体中的电磁能量自陷和水槽中水分子能量的自陷。Darydov 和庞小峰及许多科学家将这一理论运用于蛋白质和乙酰苯胺等中提出了生物能量传递的理论。

6.6 微观粒子的局域与初始条件

6.6 微观粒子的局域与初始条件

6.6.1 有初始条件时的散射数据

如前所述，微观粒子的局域密切相关于粒子的色散效应与非线性作用的平衡。在实际系统中，这种孤子运动也紧密相关于一个适当的初始微扰或激发的存在。适当的初始扰动有能力去触发和增强作用于微观粒子上的非线性相互作用，从而使粒

子被局域。因此，初始扰动与粒子局域密切相关。Brizhik 将在分子链中的孤子形成机制移植去研究了具有空间指数衰减的初始扰动的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 的解及它在时-空中的演变特性。此时式 (3.2) 中的 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ ，非线性作用系数 b 用 $2b$ 代替。他将初始条件具体表示为

$$\phi(x', 0) = \begin{cases} \sqrt{2\alpha} e^{(ik-a)x'} & \text{如果 } x' \geq 0 \\ 0 & \text{如果 } x' < 0 \end{cases} \quad (6.64)$$

式中， α 是常数； $x' = x(\sqrt{2m}/\hbar)$ 。现在用反散射方法来研究具有上述初始矩形脉冲的时间演变。按照第 3 章和第 4 章讲的这种方法，具有在无穷远处迅速衰减的上述初始条件的非线性 Schrödinger 方程，在 Lax 方法中的算符 \hat{L} 的本征方程所对应的本征值为 $\lambda = \xi + i\eta$ ，相应的波矢 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ 满足 ZS 方程式 (3.84)。此方程中的势函数 $q(x)$ 和初始函数式 (6.64) 有关系： $q'(x) = i\sqrt{b}\phi(x', 0)$ 。因此，在 $x' < 0$ 的区域内， ψ 具有

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi x'} \quad (6.65)$$

的形式，但在 $x' > 0$ 的区域中它可用 Bassel 函数 J_m 表示为

$$\psi_1 = [AJ_{-m}(y) + BJ_m(y)] e^{(ik-\alpha)x'/2}, \quad \psi_2 = -i[AJ_{-m}(y) - BJ_{m-1}(y)] e^{-(ik+\alpha)x'/2}$$

式中，
$$y = j e^{-\alpha x'}, \quad j = \sqrt{\frac{2b}{\alpha}}, \quad m = \frac{(\alpha - ik)/2 - i\lambda}{\alpha} \quad (6.66)$$

其积分常数由上述解式 (6.65) ~ 式 (6.66) 在 x' 处的连接条件决定，能求得它们为

$$A = \frac{J_{m-1}(j)}{D}, \quad B = \frac{J_{-m+1}(j)}{D}$$

和

$$D = J_m(j)J_{-m+1}(j) + J_{-m}(j)J_{m-1}(j)$$

在 $x' \rightarrow \infty$ 时的渐近解为

$$\psi = a(\lambda) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\lambda x'} + b(\lambda) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\lambda x'}$$

此处 $a(\lambda)$ 和 $b(\lambda)$ 恰好是反散射方法中的传输和反射系数，并可表示成

$$a(\lambda) = \left(\frac{2\alpha}{b} \right)^{m/2} \frac{A}{\Gamma(1-m)}, \quad b(\lambda) = i \left(\frac{b}{2\alpha} \right)^{(m-1)/2} \frac{B}{\Gamma(m)} \quad (6.67)$$

6.6.2 有初始条件时形成的局域状态

按照反散射法，在微观粒子的局域或束缚态相应于一个孤子，它由传递系数的零点决定。其孤子的速度正比于本征值的实数部，即 $v_i = -4\xi_i$ ， $\xi_i = \operatorname{Re} \lambda_i$ ，其振幅(或孤子宽度)正比于虚部， $\alpha = 2\eta_i$ ， $\eta_i = \operatorname{Im} \lambda_i$ 。从式(6.67)知道传递系数的零点满足方程

$$J_{m-1}(j) = 0 \quad (6.68)$$

根据式(6.66)，孤子的速度正比于初始激发的波数，即 $\xi = -k/2$ ，则有

$$m-1 = \mu = \frac{2\eta - \alpha}{\alpha} \quad (6.69)$$

按照多个零点缺乏(除 $j=0$ 外)和线性独立的实 Bessel 函数的根的替代理论，方程式(6.68)能得到微观粒子(孤子)的振幅 η 是初始脉冲宽度 α 的函数。又从 Shafheitlin 理论得到，微观粒子的振幅是处在 $\frac{\alpha}{2} - \sqrt{2b\alpha} < \eta < \frac{\alpha}{2} + \sqrt{2b\alpha}$ 的范围内。由于 η 关于 Bessel 函数的指标 μ ，后者又与由方程式(6.68)决定的根 j 相关。于是最后可得到的 α 和 η 的关系式为

$$\frac{d\eta}{d\alpha} = \frac{\eta}{\alpha} + \frac{bF(\eta, \alpha)}{2\eta - \alpha} \quad (6.70)$$

式中，
$$F(\eta, \alpha) = J_{\mu+1}^2(j) \left| \int_0^j J_{\mu}^2(z) \frac{dz}{z} \right|^{-1} > 0$$

从式(6.70)Brizhik 得到在 α 值非常小时，微观粒子的振幅随 α 的增加而增大。但在 $\alpha > \alpha_0$ 时，式(6.70)中的导数的符号改变。于是此 α_0 的值就由以下超越方程式 $\alpha_0 F(\eta, \alpha_0) b = \frac{\alpha_0 - 2\eta}{\eta}$ 来决定。由此，从式(6.68)~式(6.69)得出，微观粒子此时仅在 $j > 1$ 或 $\alpha < \alpha_{cr} = 0.889b$ 的条件下才有可能真正局域。在 $\alpha_{cr}^b < \alpha < \alpha_{cr}$ 时，这里 $\alpha_{cr}^b = 0.08b$ ，此时有单孤子产生，它的振幅从 0 增加到 $\eta = 0.176b$ ，并最终在 $\alpha_0 = 0.12b$ 时

达到最大值 $\eta_{\max} = 0.180b$ 。当 α 处在 $\alpha_{\text{cr}}^{2s} < \alpha < \alpha_{\text{cr}}^{ls}$ 时, 这里 $\alpha_{\text{cr}}^{2s} = 3.6 \times 10^{-2}b$, 则此方程式具有两孤子解, 其振幅处在 $\mu_{i,\min}^{2s} < \mu_i < \mu_{i,\max}^{2s}$ 之间 ($i=1, 2$)。在这种情况下, 具有大初始振幅的第一个孤子的振幅随 α 的减少而减少, 而第二个孤子振幅随 α 的减少而增加, 但始终小于第一个孤子的振幅 ($\eta_2 < \eta_1$)。如果 $\alpha \ll 1$, 则随时间指数衰减的初始脉冲变成了具有振幅为 $\eta_i/b \ll 1$ 的 N 孤子状态。当 $\alpha \rightarrow 1$ 时, 其振幅接近于 0。此类微观粒子 (孤子) 携带有一个振荡的尾巴, 这个尾巴随时间增加而减少, 并由反射系数式 (6.67) 决定。

从以上研究表明如果系统的非线性作用大于临界值, 即 $b > b_{\text{cr}} = 1.125\alpha$ 时, 则在具有指数衰减的初始扰动的作用下, 由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子仍是局域的, 也具有一个孤子解。其时 b_{cr} 由式 (6.66) ~ 式 (6.67) 决定。这也表明, 在由非线性 Schrödinger 方程描述的粒子系统中, 在受到初始扰动后粒子仍可被局域。这一研究表明初始扰动可以影响孤子的形成和粒子的局域特性。

6.7 粒子局域的实验证实

从前两章可以知道, 具有色散效应的微观粒子在受到非线性相互作用后, 改变其特性, 被局域为具有波-粒二象性的粒子。这种特性有赖于实验的证实。但是, 要用现有仪器直接观察和测量微观粒子的局域特性有许多困难。然而, 可从用同一个方程描述的光波和水波的局域特性来间接证实微观粒子在受到非线性相互作用后的局域特性的存在。如所知, 当微观粒子仅受到色散动能作用时是具有波动性的, 此波动性虽然与光波和水波有一些差别, 但其本质有相似之处, 都是线性波或色散波。于是, 从理论上可以确定微观粒子受到非线性作用后的局域特性应与光波和水波的孤立波 (局域) 的形成特性相似。这已由多年的实验和理论研究所证实。实际上, 让式 (3.1) 表示成 $\phi = \sqrt{\rho}e^{i\theta}$, 这里 $\rho = |\phi|^2$, 将它代入非线性方程式 (3.155b) 中可得 $\rho_t = -\nabla \cdot \vec{j}$, $\vec{j} = \rho \nabla \theta$ 和 $\theta_t + \frac{1}{2}|\nabla \theta|^2 - \frac{b}{2}\rho = \frac{1}{2\sqrt{\rho}}\Delta\sqrt{\rho}$ 。此方程组相当于无转动的正压气体或液体的运动方程, 其中 θ 相当于流体动力学势, 而前者恰好是流体的连续性方程。因此, 用水波动力学特性来推测非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的特性是合理的。另外, 实验研究表明光波在具有非线性作用的光纤中传播时, 确实会被局域为光孤子, 它真实满足非线性 Schrödinger 方程, 这在 6.4 节给予了清楚描述。这种机制叫做自聚焦。因此, 观察光孤子的特性用来推断微观粒子的非线性特性也是合理的。

6.7.1 在水中形成的非传播孤立波特性

在水中，科学家们真实看到了由非线性 Schrödinger 方程描述的水中非传播局域孤立波的存在。至此，虽然我们没有亲自直接观察到由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的局域特性的存在，但可从这类实验结果使我们深信不疑地相信，在非线性和系统中微观粒子的局域特性的真实存在。现在来较详细地描述这类实验的结果。首先，研究水波中分子的局域效应。

在 1898 年，斯科特·罗素在水中观察到了服从 KdV 方程的水孤立波的存在。在 20 世纪 80 年代，Wu 等人从水箱的实验观察到另一类即非传播孤立波的存在。此后，崔洪农和庞小峰等人又在各种水槽中观察到它们的存在，并深入研究了其特性，还得出许多有趣的结果。这些实验的结果证实了在受到由初始扰动造成的非线性作用力的作用下，水分子可以局域，形成钟型的非传播的局域孤立波。在此之后，很多人例如 Larraza 等，Mices 和庞小峰等从不同角度，依照水动力学的非线性特性，建立起了在此情况下的水分子在水槽中的动力学方程。它们都是一个非传播的 Schrödinger 方程。例如 Larraza 等人使用速度势满足 Laplace 方程和相应的边界条件，推导出了在水槽中水的表面波满足的方程就是如下的非传播性的非线性 Schrödinger 方程：

$$C^2 \frac{d^2 \phi}{dx^2} + (\omega_1^2 - \omega^2) \phi - A |\phi|^2 \phi = 0 \quad (6.71)$$

当 $A > 0$ 和 $k\phi > 1.022$ 时，此方程具有非传播孤立波解，为

$$\phi = \sqrt{\frac{2(\omega_1^2 - \omega^2)}{A}} \operatorname{sech} \left[\frac{(\omega_1^2 - \omega^2)x}{C^2} \right] \quad (6.72)$$

式中， $C^2 = \frac{g}{2k} [\tilde{T} + kd(1 - \tilde{T}^2)]$ ， $A = \frac{1}{8} k^4 (6\tilde{T}^4 - 5\tilde{T}^2 + 16 - 9\tilde{T}^{-2})$

这里 d 是水槽中水的深度， $k = \pi/\tilde{b}$ ，而 \tilde{b} 是水槽的宽度， $T = \tanh(kd)$ ， $\omega_1^2 = gkT$ ，其中 g 是重力加速度， ω 是外场的扰动频率。

对于这个现象，Miles 得出了另一个稍微不同形式的非线性 Schrödinger 方程：

$$B\phi_{xx} + (\beta + A|\phi|^2)\phi + v\phi^* = 0 \quad (6.73)$$

在 $v=0$ 时，它的解为

$$\phi = e^{i\theta} \operatorname{sech} \left(\sqrt{\frac{A'}{2B}} X \right) \quad (6.74)$$

式中,

$$B = \tilde{T} + kd(1 - \tilde{T}^2), \quad A' = \frac{1}{8}(6\tilde{T}^4 - 5\tilde{T}^2 + 16 - 9\tilde{T}^{-2})$$

$$\beta = \frac{(\omega^2 - \omega_1^2)}{2\varepsilon\omega_1^2}, \quad r = \frac{\omega^2 a_0}{\varepsilon g}, \quad \omega_1 = \sqrt{gk \tanh(kd)}, \quad X = 2\sqrt{\varepsilon\tilde{T}}kx$$

a_0 和 θ 是一些常数, ε 是一个小的正标度参数。

庞小峰等人得出了如下的非线性 Schrödinger 方程:

$$\frac{\partial^2 \phi_n}{\partial x^2} - k^2 \phi_n(x) + \gamma' |\phi_n|^2 \phi_n = 0 \quad (6.75)$$

它具有以下孤立波解: $\phi = B_n \phi_n(x) \cos(k_n y) \frac{\cos[k'_n(z+d)]}{\cos(k'_n d)}$

式中

$$\phi_n(x) = B_n \sqrt{\frac{2k^2}{\gamma'}} \operatorname{sech} \left[\sqrt{k^2} (x - x_0) \right] \frac{\cos[k'_n(z+d)]}{\cos(k'_n d)} \cos(k_n y) \quad (6.76)$$

和

$$k^2 = k_n^2 + k_n'^2, \quad \gamma' = \frac{\alpha^2 B_n^2}{\rho^2 (\omega^2 - \omega_0^2)}$$

$$\omega_0^2 = \beta / \rho, \quad k_n = \frac{\pi}{b} n, \quad k'_n = \frac{\pi}{d} n \quad (n=1, 2, 3 \cdots)$$

其中, β 是表面张力常数; ρ 是水的密度; α 是表面水波的非线性作用系数。从式 (6.71) ~ 式 (6.76) 可以清楚看到, 水槽中产生的非线性传播孤立波总是可用一个与时间无关的非线性 Schrödinger 方程来描述, 它的解是钟型形状的孤立波, 并具有局域的特征。这表明水分子在水槽中的非线性作用力的作用下而被局域。

现在来陈述崔洪农和庞小峰等从实验中得出的这种非传播水孤立波的特性。在这个实验中所使用的实验装置是 38 cm 长和 2.0 ~ 5.0 cm 宽的水槽。将水充满到 $d = 2.0 \sim 5.0$ cm 高的深度, 并将它放到一个能振动的平台上, 用一个电动发动机驱动它以 7 ~ 15 Hz 的频率做垂直振动。另外一个信号发生器使它在水平方向上以 12 ~ 15 Hz 的频率做纵向振动, 用一个功率放大器放大信号, 并使用另外一个测试仪一起测定它的信号。在初始时刻, 其驱动信号发生器的频率低于某一阈值时, 在水的表面上仅能看到一些小水波纹。在此情况下, 水分子是均匀分布于水面上的。但是当驱动频率高于此阈值时, 在一个非线性的初始扰动加于水表面时, 在水表面便出现一个以驱动频率之半振动的参量激发波。此时, 会有大量水分子聚焦在一起, 在表面的一个特定位置形成水分子密度极大的一个非传播的钟型孤立波, 如图 6.8 所示。它的剖型与非线性量子力学中

由 Schrödinger 方程的孤子(参见图3.7)形状完全相同。在这种现象中一个明显的特性就是所产生的非线性相互作用使大量的水分子的自局域或自陷，并聚集在一起，形成确定形状的实体。实际观察到在出现非传播孤立波的位置处水分子密度急剧增大，并出现旋转运动，如图 6.9 所示。

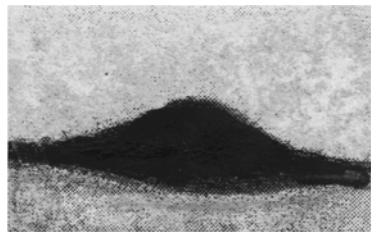


图 6.8 在水槽中出现的非传播孤立波

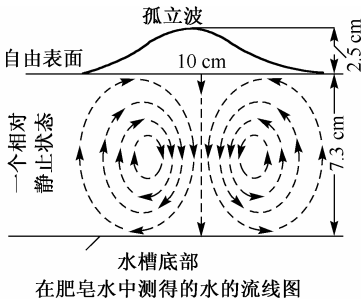


图 6.9 出现非传播孤立波处的水分子密度增大，并出现水分子的旋转运动

如用适当的其他频率产生不同的初始扰动，则在表面还会产生两个、三个等多种孤立波。但是在不同液体中产生的这些孤立波的形状是不同的。如果驱动频率进一步增加，还会产生其他不同的非传播的孤立波。从这一实验求得了水中局域孤立波形成的条件如下：

- (1) 液体必须有一个适当的深度。
- (2) 液体的表面张力必须小于一个特定值，其上限值与液体的特性有关。
- (3) 垂直驱动频率一定要与水的固有频率相当，其驱动的振幅必须控制在特定的范围内。
- (4) 必须有一个非线性的初始扰动施于液体表面。
- (5) 水槽不能太宽。

另一个显著的特点是产生的孤立波在 x 轴方向上有一个确定位置，这是它的“质心”。但可在 y 轴方向用它的固有频率振动，在 x 轴方向的剖型是一钟型，其形状可用 $\text{sech}X$ 波形函数描绘。在 4 种不同类型的液体中产生的孤立波的实际形状示于图 6.10 中，其中的实曲线 I 表示了理想液体(表面张力接近于 0)的孤立波剖型，曲线 V 是甘油水的结果。从图中看到在表面张力增加时，所产生的孤子的振幅增加，其宽度减少。如果表面张力系数大于其上阈值时，没有孤立波产生。

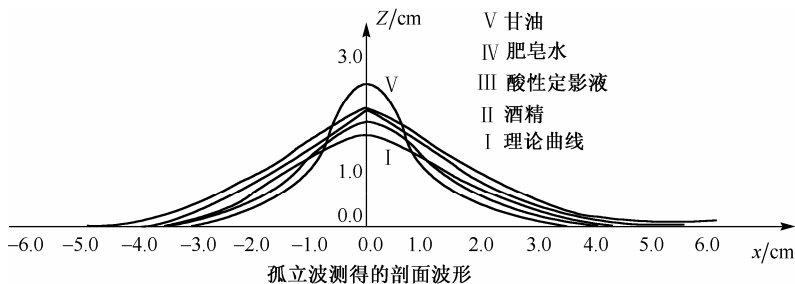


图 6.10 不同液体中形成的非传播孤立波在 x 轴方向上的波形

同时，实验还观察到当孤立波受到一个外力作用，如用风吹它时，它会发生运动。当用盐水加在非传播孤立波的一边，以增加此部分水的表面张力时，这个孤立波会向增加表面张力的部分运动；当水槽倾斜到斜率为 0.05 的形状时，此孤立波会向水浅的方向运动。如果深度达到一个形成孤立波的极小值时，则它的运动停止。同时也观察到，小振幅的异相孤立波能阻碍原有孤立波的运动。因此，这种水孤立波的运动特征很类似于经典粒子，并与前几章描述的非线性量子力学中微观粒子的运动特征相似。

在两个非传播孤立波的相互作用中观察到异相孤立波相斥，但不会消失的现象，如图6.11所示。在两个同相孤立波之间的相互作用中随驱动振动的增加，观察到出现吸引-吞食-分开-再吸引等周期性变化过程，如图6.12所示。这两个孤立波碰撞特征很类似于第5章中描述的两微观粒子之间的碰撞过程。于是在非线性量子力学中的微观粒子的碰撞得到了实验的证实。在水平驱动水槽的实验中，当水的深度增加时，驱动的频率也要增加。如果水槽在水平方向上转动时，让水槽与驱动方向从 90° 变到 150° 时，该孤立波仍能保持在原有位置而不动。类似的现象也在非矩形水槽如三角形、圆形和 V 型、环型及 X 型水槽中观察到。这些现象表明非线性传播孤立波的产生与水槽的形状无关，仅由槽中液体的特性相关。如果水被磁化了，则此时较容易形成水孤立波，这是因为磁化水的表面张力减少的缘故。

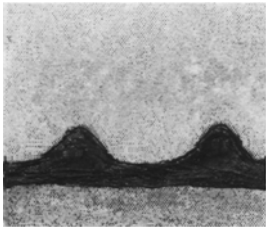


图 6.11 在两个异相孤立水波之间的排斥效应

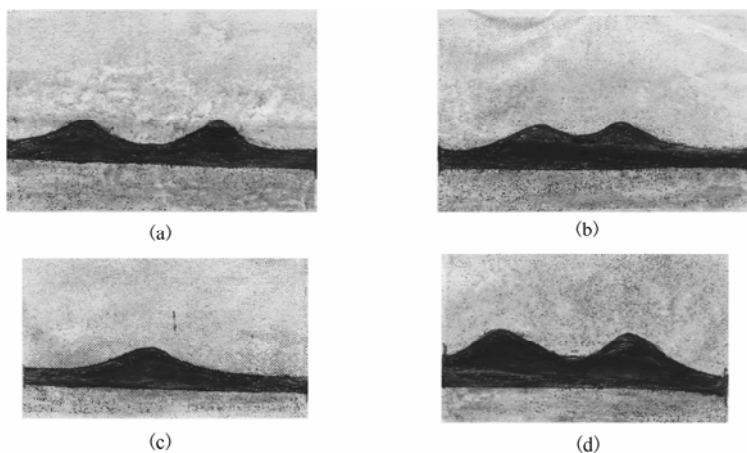


图 6.12 同相的两个孤立水波之间的碰撞特性

6.7.2 在光纤中传播的光的自聚焦现象

从6.4节的讨论可知,光孤子和光波的自聚焦效应能够由光纤的 **Kerr** 效应产生的非线性相互作用引起。这时的光波自聚焦为光孤子在光纤中传播,并遵守非线性 **Schrödinger** 方程。于是可用光波在光纤中的自聚焦效应来理解和证实微观粒子在非线形相互作用下的自局域效应。

为了从实验上证明光孤子在光纤中的存在,必须应用损耗率小于 1 dB/km 的光纤。在其中首先产生足够的功率的短光脉冲,于是使用极窄宽度的激光。1980 年 **Mollenauer** 等人在 **Bell** 实验室成功地实现了光孤子在光纤中的传输。他们使用了由 **Nd: VAG** 激光器泵出的 Fe^{2+} 色心激光器和长为 700 m , 横截面积为 10^{-6} cm^2 的光纤传播了一个 7 ps 宽的光脉冲,用自动修正器检测了输出光的形状。图 6.13 示出了实验的结果。输出脉冲的形状用自动修正器检测。从图 6.13 中我们清楚地看到对低于 1.2 W 的输入脉冲产生的输出脉冲的宽度是增加的。但当输入功率高于 1.2 W 时,所产生的输出脉冲刚好相反,它的宽度连续减少。对于 11.4 W 的输入功率所出现的两个峰值是由于在此情况下产生的三个孤子相互间干涉引起的结果。这与由 **Hasegawa** 等人用数值模拟方法得到的结果一致。关于高阶孤子的周期性行为由 **Stolen** 等人的实验所证实。由于需要产生傅里叶变换极限脉冲,所以光孤子的实验观察大多用色心激光器来实现,但也可用染料激光器和激光二极管来实现。为了产生一个好的宽带光孤子必须控制频率的变窄效应。

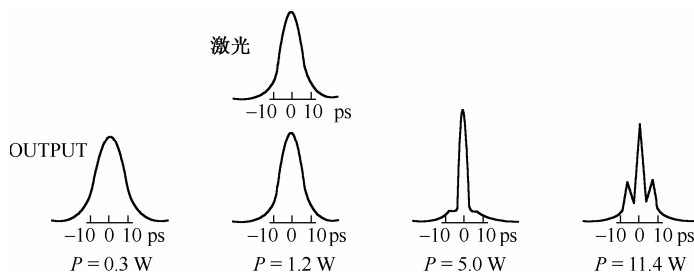


图 6.13 Mollenauer 等人观察到的光孤子脉冲

关于光孤子之间的相互作用的特点由 Mischke 和 Mollenauer 在 1987 年从实验上做了深入研究。他们观察到两个孤子不但可以相互吸引，也可相互排斥，这些现象依赖于两光波的相位差。在这一实验中，光孤子是由一孤子激光器产生的。首先，通过 Michelson 干涉仪给出一对脉冲，干涉仪的一个分支臂的长度允许在两个脉冲之间的间距内有一个从 0 到若干皮秒的变化，并对孤子之间的相差进行了测定。在此实验中，他们使用了一种特殊方法产生一极化强度以保持对 $1.52 \mu\text{m}$ 波长的光在 $D = 14.5 \text{ ps}/(\text{nm} \cdot \text{km})$ 的光纤中传输过 340 m 的长度过程中总是低损耗的，其脉冲的持续时间为 1 ps，因此光纤的长度大约是 10 个孤子时间。这样长的光纤能使研究者清楚地观察到两个分开的光孤子的相互作用。关于它们之间的排斥和吸引效应的测量结果示于图 6.14 中 (参见 Abdullabber 等人 1994 年出版的书籍)。所观察到的结果不同于在吸引相互作用时，由光孤子理论所预示的结果。按照在第 5 章的理论计算的结果，两个互相作用的微观粒子 (孤子) 在碰撞后是彼此通过的。这个情况在图 6.14 中用理论曲线的振荡结构表示。而实验数据稍微偏离了这一特征。由于 Raman 自频移的影响，在不稳定区这个吸引力变成了排斥力。

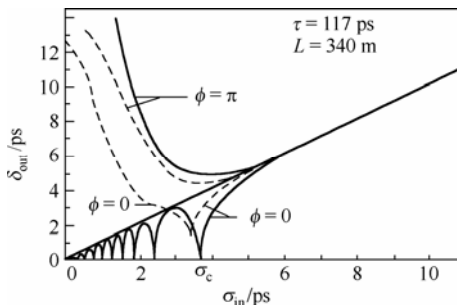


图 6.14 在 340 m 处光纤产生的输出脉冲分离 (δ_{out}) 与输入脉冲分离 (σ_{in}) 的关系，其中实线为理论值，虚线为实验值。在无相互作用时，所有点都落在倾斜角为 45° 的直线上

Mollenauer 和 Smith (1990 年) 发现当两个光孤立波分开一个长距离 (大约 1000 km) 时, 在它们之间存在一个与相位无关的长程相互作用。Dianov 等人 (1990 年) 证明了电致伸缩机制可能导致观察到的反常相互作用。这些结果证明了在两个传播的孤子之间存在相互作用, 其作用的效果依赖于在这些光孤子之间的相位和间距 (参见 Abdullaber 等人 1994 年出版的书籍)。

除此之外, Vysloukh 和 Cherednik (1986 年) 在反散射理论和数值计算方法相结合的基础上发展了一种有效的方法, 讨论了光孤子的相互作用, 得出了它们随时间变化的演变特征。这些结果与由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子得出的结果是相一致的。

总结起来, 从由非线性 Schrödinger 方程描述的非传播水孤立波和光纤中得到的光孤子的局域特性的存在和它们之间相互作用的特点都与前几章从非线性量子力学得出的, 由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子的局域特性与相互作用的特征相同或相似。这样就从实验证明了在微观粒子受非线性相互作用后确实被局域化, 从而具有波-粒二象性的特性。

习题

1. 验证式 (6.7) 满足式 (6.6)。
2. 验证式 (5.45) 能满足式 (5.44), 并求出 $\varphi(\xi)$ 的显式结果。同时, 在周期性边界条件 $\phi(x, t) = \phi(x + r_0 l, t)$ 和归一化条件下求出能量、动量以及速度的量子化表示式。
3. 利用

$$k - k_0 = \left. \frac{\partial k}{\partial \omega} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0) + \left. \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^2 + \left. \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 k}{\partial \omega^3} \right|_{\omega_0} (\omega - \omega_0)^3 + \dots$$

求出其粒子的色散方程:

$$i \left(\frac{\partial}{\partial t} - k' \frac{\partial}{\partial x} \right) \varphi - \frac{k''}{2!} \cdot \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = 0$$

其中,

$$k' = \frac{\partial k}{\partial \omega}, \quad k'' = \frac{\partial^2 k}{\partial \omega^2}$$

4. 比较非线性相互作用的自相互作用机制、自聚焦机制和自阱机制等之间的差别和联系。

第 7 章 求解非线性量子力学问题的方法

在第 3~6 章中分别阐述了非线性量子力学的基本原理与理论,包括本征值理论、量子化理论、相对性理论、散射和微扰理论等,以及微观粒子的基本特性和粒子局域的根本与非线性作用的产生机理和特点等非线性量子力学的基本问题。本章主要给出求解一个非线性量子力学问题的方法和手段。这个问题也很重要,因为只有将这些动力学方程求解出来,才能进一步深入研究和解决非线性量子力学问题,以求得微观粒子在不同情况下的运动规律和特性。因此,研究和掌握这些方法显得非常必要。由于非线性问题错综复杂,求解的方法也完全不同于线性量子力学。在后者中主要是找出粒子受的外势场的具体形式,再代入线性 **Schrödinger** 方程即可求解。这套方法在非线性量子力学中不可行了,因为在非线性 **Schrödinger** 方程中的非线性作用力的具体形式在不同的系统中有不同的表现形式,并且不是预先知道的。至此,即使知道了外势场的具体形式也不能直接求解非线性 **Schrödinger** 方程。因此,求解非线性量子力学问题必须从头开始。即首先分析体系中微观粒子的运动特征和相互作用的具体情况,再给出体系的哈密顿量或拉格朗日密度函数,再用 **Schrödinger** 方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\phi\rangle = \hat{H}|\phi\rangle$ 或海森堡方程或拉格朗日-欧拉方程或哈密顿方程给出粒子的动力学方程。在非相对论情况下,它们一定是非线性 **Schrödinger** 方程。在相对论下它们是 ϕ^4 方程或 **Sine-Gordon** 方程。这样做后,会直接得到非线性相互作用的具体形式,则求解才能维持下去。最后求出这些方程的解,这就是研究非线性量子力学问题的基本方法和途径。在下面主要介绍求解非线性量子力学动力学方程的一些基本解析方法。其实,数值计标法也常用于求解非线性动力学方程,它包含有 **Monte-Cole** 方法、**Runge-Kutta** 方法、格点计算法和从头算起法,等等。这些方法中的大多数是将连续的非线性动力学方程离散化为相应的分立动力学方程来进行数值计算。这些方法的计算过程较为复杂,不在这里讨论,读者可参考有关书籍。在第 8 章我们将列举一些具体的例子来阐明 **Runge-Kutta** 方法的运用。本章主要给出了求解非线性量子力学中粒子的不同类型的动力学方程的方法,并给出了求解二维和三维的动力学方程的一些常见解法。

7.1 函数和变量变换方法

在求解方程时,经常采用函数或变量代换方法将一个复杂的方程简化为一个易于求解的方程或方程组来进行。常用以下一些变换法。

7.1.1 函数互换法

如非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 常采用函数变换, 如 $\phi = \sqrt{\rho} e^{i\theta(\vec{r}, t)}$ 或 $\phi = \varphi(x \cdot t) e^{i\theta(x \cdot t)}$ 变换, 把它分解为两个方程式进行求解。此方法在 2.3 节和第 3 章与第 6 章中介绍过。

7.1.2 变量变换和特征线

常采用的变量变换形式有 $\xi = x - vt$, $\eta = x + vt$ 等。例如, 对于一维线性流体方程 $\frac{\partial \phi}{\partial t} + v \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$, 采用此变换后变成 $\frac{\partial \phi}{\partial \eta} = 0$ 。其解可表示为 $\phi = \phi(x + vt)$, 其方程 $\frac{dx}{dt} = v$ 。 $\frac{dx}{v} = \frac{dt}{1} = \frac{d\phi}{0}$ 称为此方程的特征方程, $\frac{dx}{dt}$ 称为特征方向, 而 $\xi = x - vt = \text{constant}$ 称为方程的特征线, 在特征线上的值是常数, 而 ϕ 具有流体的 Riemann 不变性。

对于一维的线性流体方程, $\frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$, 它的特征线是 $\frac{dx}{dt} = u(x \cdot t)$ 。在此情况下的变量变换为 $\xi = x - u(x, t)t$, $\eta = x + u(x, t)t$, 使用它们, 上述方程就变为 $\frac{d\phi}{d\eta} = 0$, 这里, $u(x, t) = u = \text{constant}$ 。于是方程就易于求解了。

7.1.3 另外一些变换

如果假设 $\xi = x - y$, $\eta = x + y$, 那么 Liouville 方程式 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = \Lambda e^u$ 将变为 $\partial^2 \phi / \partial \eta \partial \xi = \frac{\Lambda}{4} e^u$, 这里 Λ 是一个常数。如果做变量变换 $\xi = \frac{x-t}{2}$ 和 $\eta = \frac{x+t}{2}$, 则 Sime-Gordon 方程式 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = \sin \phi$ 变成 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta \partial \xi} = \sin \phi$, 等等。这些方程在变换后就易于求解了。

7.1.4 自相似变换法

现假设 $\phi(x \cdot t)$ 是方程 $P\phi = 0$ 的解, 如果让 x , t 和 $\phi(x \cdot t)$ 做以下变换:

$$\begin{aligned}\tilde{x}' &= x + \varepsilon X(x, t, \phi) + O(\varepsilon^2) \\ \tilde{t}' &= t + \varepsilon T(x, t, \phi) + O(\varepsilon^2) \\ \phi' &= \phi + \varepsilon \Phi(x, t, \phi) + O(\varepsilon^2)\end{aligned}\tag{7.1}$$

这里 ε 是一个小参数, 则变换式 (7.1) 称为无穷小变换, 而 X , T 和 Φ 称为 \tilde{x}' , \tilde{t}' 和 ϕ' 的第一阶系数。如果要求 $\phi'(\tilde{x}', \tilde{t}')$ 满足上述相同方程, 则有

$$X \frac{\partial \phi}{\partial x} + T \frac{\partial \phi}{\partial t} = \Phi \quad \text{和} \quad \frac{dx}{X} = \frac{dt}{T} = \frac{d\phi}{\Phi}$$

由于这些方程在式 (7.1) 的变换下是不变的, 而 X, T 和 Φ 又是独立的, 则可假设 $T=1$, 于是从 $dx/dt = X$ 和 $d\phi/dt = \Phi$ 可得 $f(x, t) = \text{constant}$ 和 $g(x, t, \phi) = \text{constant}$ 。如果相似变量选择为 ξ 和 $\tilde{\phi}$, 则 $\xi = f(x, t)$ 和 $\tilde{\phi} = g(x, t, \phi)$ 就称为自相似变换。从 $\tilde{\phi} = g(x, t, \phi)$ 得到的解 $\phi(x, t)$ 称为自相似解。于是自相似变换 $\xi = f(x, t)$ 和 $\tilde{\phi} = g(x, t, \phi)$ 经常表示为 $\xi = a(t)x$, $\tilde{\phi}(\xi) = \phi(x, t)/\beta(t)$, 则自相似解可表示为 $\phi(x, t) = \beta(t)\tilde{\phi}(a(t), x)$ 。

对于线性热传导方程: $\frac{\partial \phi}{\partial t} = \gamma \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$, 这里 γ 是一个常数, 它的自相似变换为: $\xi = \frac{x}{\sqrt{t}}$, $\tilde{\phi} = \frac{\phi}{t}$, 则其解为 $\phi = t\tilde{\phi}\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right)$ 。在这种变换下, 原方程变为 $\gamma \frac{d^2 \tilde{\phi}}{d\xi^2} + \frac{\xi}{2} \frac{d\tilde{\phi}}{d\xi} - \gamma = 0$ 。

对于 Sine-Gordon 方程: $\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi \partial \eta} = \sin \phi$, 它的自相似变换为 $\varsigma = \xi\eta$, $\tilde{\phi} = \phi$, 则原方程式变为 $\xi \frac{d^2 \tilde{\phi}}{d\varsigma^2} + \frac{d\tilde{\phi}}{d\varsigma} = \sin \tilde{\phi}$ 。现在该方程容易求解了。

7.1.5 Galilei 变换

对于式 (3.155b) 的非线性 Schrödinger 方程, 当设 $x' = x\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}$ 和 $t' = \frac{t}{\hbar}$ 时, 它的解现简单表示为 $\phi(x', t') = A \text{sech}(Ax') \exp\left(-i \frac{A^2 t'}{2}\right)$ 。

由于此时的非线性 Schrödinger 方程在 Galilei 变换: $\bar{x} = x' - vt'$, $\bar{t} = t'$ 和 $\phi'(\bar{x}, \bar{t}) = e^{i v x' - i v^2 t'/2} \phi(x', t')$ 下是不变的, 则其解便为

$$\phi(x', t') = A \text{sech}[A(x' - vt')] \exp\left[-i v x' + i \frac{(v^2 - A^2)t'}{2}\right] \quad (7.2)$$

如果让 $v = 2\xi$ 和 $A = 2\eta$, 则它就和 Zhakharov 和 Shabat 等人用反散射法求得的解式 (3.95) 一致。在式 (3.2) 中的 $V(x') = ax'$ 和 $V'(x') = a^2 x'^2$ 及 $A(\phi) = 0$ 时的解, Chen 和 Liu 等人就用上述 Galilei 变换将它们化简为 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 时的式 (3.2), 从而求出了它们的解, 这在前面已经描述过。

总之, 这种函数和自变量的变换方法很多。依照具体情况, 可采用不同的方法求其方程式的解。

7.2 行波法

7.2.1 非线性Schrödinger方程的行波法

为求式(3.2)在 $V(x, t) = A(\varphi) = 0$ 时的非线性Schrödinger方程(3.155)的行波解, 可假设解具有 $\phi(x, t) = \phi(\xi)e^{i(kx' - \omega t')}$ 的形式, 这里 $\xi = x' - vt'$, $x' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}x$, $t' = \frac{t}{\hbar}$ 。利用这个新变量, 式(3.155)可写成

$$\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + (\omega - k^2)\phi(\xi) - b\phi^3 = 0 \quad (7.3)$$

当 $b > 0$, $\gamma = \omega - k^2 > 0$ 时, 式(7.3)的行波解可以很容易地得出, 为

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{2\gamma}{b}} \operatorname{sech}\left(\sqrt{\gamma}(\xi - \xi_0)\right) e^{i(kx' - \omega t')} \quad (7.4)$$

当 $r < 0$ 和 $b < 0$ 时其行波解为

$$\phi(x, t) = \sqrt{\frac{|\gamma|}{|b|}} \tanh\left(\frac{\sqrt{|\gamma|}}{2}(\xi - \xi_0)\right) e^{i(kx' - \omega t')} \quad (7.5)$$

如果假设行波解具有以下形式:

$$\phi(x', t') = \tilde{\phi}(\xi) e^{i\Omega t' + iQx'}$$

在式(3.155)中的 $b = 2$ 时变成

$$\tilde{\phi}_{\xi\xi}(\xi) + i(2Q - v)\tilde{\phi}_{\xi} - \tilde{\phi}(\xi)(\Omega + Q^2) + 2\tilde{\phi}^3(\xi) = 0 \quad (7.6)$$

若让 $\tilde{\phi}_{\xi}(\xi)$ 的复系数趋于零, 则可得 $Q = v/2$ 。再假设 $A = (\Omega + Q^2)$, 则可得 $\Omega = -v^2/4 + A$, 于是式(7.6)变成

$$\phi_{\xi\xi} - A\phi + 2\phi^3 = 0$$

方程积分后

$$(\phi_{\xi})^2 = D + A\phi^2 - \phi^4$$

这里 D 是积分常数。则上式可转化为一个椭圆积分, 可得

$$\int_{\phi_0}^{\phi} \frac{d\phi}{\sqrt{D + A\phi^2 - \phi^4}} = \pm \xi$$

让 $P(\phi) = D + A\phi^2 - \phi^4 = (\beta_1 - \phi^2)(\phi^2 - \beta_2)$, 则有 $\frac{1}{\sqrt{\beta_1}}\{K(k) - F(\phi, k)\} = \pm \xi$, 此处

$F(\phi, k)$ 是一个不完全椭圆积分, 而 $k = \sqrt{\frac{\beta_1 - \beta_2}{\beta_1}}$, $\beta_{1,2} = \frac{A}{2} \pm \sqrt{\frac{A^2}{4} + D}$, $\beta_{1,2} = \phi_{1,2}^2$ 。利用

这些关系, 可得

$$\phi(\xi) = \phi_1 \left\{ 1 - \left[\left(1 - \frac{\phi_1^2}{\phi_0^2} \right) \text{sn}^2(\xi, k) \right] \right\}^{1/2}$$

当 $D \rightarrow 0$, $\phi_1 \rightarrow \phi_0$, $k \rightarrow 1$, $\phi \rightarrow \phi_0 \text{sech} \phi_0 \xi$ 时, 这里 $\phi_0 = \sqrt{A}$, 则所求的非线性 Schrödinger 方程的孤子解为

$$\phi_s(x, t) = \sqrt{A} \text{sech} \left[\sqrt{A} (x' - vt') \right] \exp \left[i \left(-\frac{1}{4} v^2 t' + \frac{1}{2} vx' + At' \right) \right] \quad (7.7)$$

相应的单孤子解的正则形式在式(7.2)或式(3.95)中给出。

7.2.2 Sine-Gordon方程的行波法

现设 $\tilde{\xi} = x - vt$, 则 Sine-Gordon 方程

$$\phi_{tt} - v_0^2 \phi_{xx} + h_0^2 \sin \phi = 0 \quad (7.8)$$

变成

$$(v^2 - v_0^2) \frac{d^2 \phi}{d\tilde{\xi}^2} + h_0^2 \sin \phi = 0$$

如果 $v^2 > v_0^2$, 则式(7.8)可写成

$$\frac{d^2 \phi}{d\tilde{\xi}^2} + \beta^2 \sin \phi = 0, \quad \beta^2 = h_0^2 / (v^2 - v_0^2) \quad (7.9)$$

方程式(7.9)类似于无衰减的摆动方程, 现将它分解为以下两个方程

$$\frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} = \Phi, \quad \frac{d\Phi}{d\tilde{\xi}} = -\beta^2 \sin \phi \quad (7.10)$$

则可得

$$\frac{d\Phi}{d\phi} = -\frac{\beta^2 \sin \phi}{\Phi}$$

于是得到

$$\frac{1}{2} \Phi^2 + \beta^2 (1 - \cos \phi) = A \quad (7.11)$$

A 是一个积分常数, 使用式(7.10), 并让 $A = 2\beta^2 k^2$, 则式(7.11)可写成

$$\left(\frac{d\phi}{d\tilde{\xi}} \right)^2 = 4\beta^2 \left[k^2 - \sin^2 \frac{\phi}{2} \right] \quad (7.12)$$

当 $0 < k^2 = A/2\beta^2 < 1$, 则式(7.12)的解为

$$\sin \left(\frac{\phi}{2} \right) = \pm k \text{sn} \left[\beta(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_0), k \right] \quad (7.13)$$

如果让 $k \rightarrow 1$, 则式(7.13)可用

$$\sin\left(\frac{\phi}{2}\right) = \tanh\left[\pm\beta(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_0)\right]$$

或用

$$e^{\pm\beta(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_0)} = \left[\frac{1 + \sin(\phi/2)}{1 - \sin(\phi/2)} \right] = \tan\left(\frac{\phi}{4} + \frac{\pi}{4}\right)$$

代替。最后求得 Sine-Gordon 方程式 (7.8) 的 Kink 孤子解为

$$\phi_{\pm} = -\pi + 4\arctan e^{\pm\beta(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_0)} \quad (7.14)$$

当 $v^2 < v_0^2$ 时, 方程式 (7.13) 变成

$$\left(\frac{d\phi}{d\tilde{\xi}}\right)^2 = 4\beta'^2 \left[\sin^2 \frac{\phi}{2} - k^2 \right], \quad \beta'^2 = h_0^2 / (v_0^2 - v^2)$$

在 $k' \rightarrow 1$ 和 $k'^2 = 1 - k^2$ 时, Sine-Gordon 方程式 (7.8) 的 Kink 孤子解为

$$\phi = 4\arctan \left\{ \exp\left[\pm\beta'(\tilde{\xi} - \tilde{\xi}_0)\right] \right\} \quad (7.15)$$

若使用无量纲的变量: $t' = h_0 t$, $x' = \delta x$, $\delta = h_0 / v_0$, 方程式 (7.8) 可写成

$$\phi_{x'x'} - \phi_{t't'} = \sin \phi \quad (7.16)$$

根据式 (7.14) 和式 (7.15) 的特点, 式 (7.16) 的解的具有形式

$$\phi = 4\arctan \left[\frac{Y(x')}{T(t')} \right] \quad (7.17)$$

则 T 和 Y 满足的方程式为

$$(Y^2 + T^2) \left(\frac{Y_{x'x'}}{Y} + \frac{T_{t't'}}{T} \right) - 2[(Y_{x'})^2 + (T_{t'})^2] = T^2 - Y^2 \quad (7.18)$$

对式 (7.18) 相对于 t' 和 x' 求微分, 并用 $YY_{x'}$ 和 $TT_{t'}$ 除以这个方程, 可得

$$\frac{1}{YY_{x'}} \left(\frac{Y_{x'x'}}{Y} \right)_{x'} = \frac{1}{TT_{t'}} \left(\frac{T_{t't'}}{T} \right)_{t'} = 4q \quad (7.19)$$

这里 $4q$ 是常数, 积分以上两个方程式可得

$$\frac{Y_{x'x'}}{Y} = 2qY^2 + a_1, \quad \frac{T_{t't'}}{T} = -2qT^2 + a_2 \quad (7.20)$$

于是, 有 $(Y_{x'})^2 = qY^4 + a_1Y^2 + d_1$, $(T_{t'})^2 = -qT^4 + a_2T^2 + d_2$ (7.21)

这里 a_1 , a_2 和 d_1 , d_2 是一些积分常数。将式 (7.20) 和式 (7.21) 代入式 (7.18), 可得 $a_1 - a_2 = 1$, $d_1 + d_2 = 0$ 。如果选 $a_2 = -a$, $d_1 = d$, 则 $a_1 = 1 - a$, $d_2 = -d$ 。当 $q = -1$,

$d=0$ 时, 式(7.21)变成

$$Y_x^2 = -Y^4 + (1-a)Y^2, \quad T_t^2 = T^4 - aT^2 \quad (7.22)$$

如果 $0 < a < 1$ 时, 积分式(7.22), 并取积分常数为 0, 则有

$$-\frac{1}{\sqrt{1-a}} \operatorname{ar} \operatorname{sech} \left(\frac{Y}{\sqrt{1-a}} \right) = \pm x' = \pm \delta x, \quad \frac{1}{\sqrt{a}} \arcsin \left(\frac{\sqrt{a}}{T} \right) = \pm t' = \pm h_0 t$$

$$\text{则有} \quad Y = \sqrt{1-a} \operatorname{sech}(\sqrt{1-a} \delta x), \quad \frac{1}{T} = \pm \frac{1}{\sqrt{a}} \sin(\sqrt{a} h_0 t) \quad (7.23)$$

将式(7.23)代入式(7.17), 可得 Sine-Gordon 方程式(7.16)的呼吸子解为

$$\tan \left(\frac{\phi}{4} \right) = \pm \sqrt{\frac{1-a}{a}} \frac{\sin(\sqrt{a} h_0 t)}{\cosh(\sqrt{1-a} \delta x)} \quad 0 < a < 1 \quad (7.24)$$

7.2.3 ϕ^4 场方程的行波解

对于如下的 ϕ^4 场方程式

$$\phi_{tt} - v_0^2 \phi_{xx} + \alpha' \phi - \beta' \phi^3 = 0 \quad (7.25)$$

设 $\xi = x - vt$, 利用以上方法, 在 $v^2 > v_0^2$, $\alpha' > 0$, $\beta' > 0$ 或 $v^2 < v_0^2$, $\alpha' < 0$, $\beta' < 0$ 时其解为

$$\phi = \pm \sqrt{\frac{\alpha'}{\beta'}} \tanh \left[\sqrt{\frac{\alpha'}{2(v^2 - v_0^2)}} (\xi - \xi_0) \right] \quad (7.26)$$

但在 $v^2 > v_0^2$, $\alpha' < 0$, $\beta' < 0$ 或 $v^2 < v_0^2$, $\alpha' > 0$, $\beta' > 0$ 时, 其解为

$$\phi = \pm \sqrt{\frac{2\alpha'}{\beta'}} \operatorname{sech} \left[\sqrt{\frac{-\alpha'}{2(v^2 - v_0^2)}} (\xi - \xi_0) \right] \quad (7.27)$$

因此, 可用此方法求出各种不同类型的动力学方程的解。

7.3 反散射法

反散射方法首先由 Gardner, Green, Kruskal 和 Miara (GGKM) 于 1967 年在求解了 KdV 方程的解时提出的。他们把所求的非线性动力学方程的解与线性 Schrödinger

方程式 $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + (\lambda - \phi) \psi = 0$ 的解相联系起来, 通过 GGKM 变换 $\phi = \frac{1}{\psi} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \lambda(t)$ 求出其

解。1968 年 Lax 给出反散射法更一般的公式, 即对于一个任意非线性方程 $\phi_t = K(\phi)$, 可寻找到依赖于 ϕ 的两个相应的线性算符 \hat{L} 和 \hat{B} , 它们满足 $i\hat{L}_t = \hat{B}\hat{L} - \hat{L}\hat{B}$, 其散射算

符 \hat{L} 满足线性本征方程式 (3.81)，而散射波的时间进展满足式 (3.80)。对于一个给定的初始值 $\phi(x, 0)$ ，不是直接通过非线性动力学方程求出其解 $\phi(x, t)$ ，而是通过上述步骤求一个积分方程的解，即从初始条件求出散射数据，然后由事件进展方程确定散射数据随时间的演化规律，再用它们构成非线性方程的解 $\phi(x, t)$ ，因此它是散射问题的反问题，故称为反散射法。这方面最关键和最困难的一步是缺乏系统寻找算符 \hat{L} 和 \hat{B} 的方法。但对 $V(x, t) = A(\phi) = 0$ 的非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 的 \hat{L} 和 \hat{B} 已被确定，如式 (3.82)。1971 年和 1973 年 Zakharov 和 Shabat 求出了此方程的解。1973 年 Ablowitz 用此法求出了 Sine-Gordon 方程的解。现采用此法求出具有初始条件的非线性 Schrödinger 方程的解。

7.3.1 非线性 Schrödinger 方程的反射方法

如前所述，式 (3.155) 的非线性 Schrödinger 方程所对应的线性算符 \hat{L} 和 \hat{B} 为式 (3.82) 决定，它们依赖于 $\phi(x, t)$ ，即 $\phi(x, t)$ 满足的非线性 Schrödinger 方程式 (3.155) 恰好是线性方程组：式 (3.80) 和式 (3.81)，的相容性条件，其中 λ 或 k 是谱参数， ψ 是 Jost 函数，可表示成 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ 。

按照反散射的方法，已在 3.6 节给出了线性 Schrödinger 方程的散射数据 $a(\lambda, t)$ ， $b'(\lambda, t)$ 和 $c_m(t)$ 随时间的变化，它们分别表示在式 (3.92) 和式 (3.93b) 中。现应用这些数据来构成非线性 Schrödinger 方程式 (3.155) 的孤子解。为此，现定义一个函数

$$\Psi(\lambda, x') = \begin{cases} a^{-1}(\lambda) \alpha(\lambda, x') e^{i\lambda x'} & \text{Im } \lambda > 0 \\ \bar{\alpha}'(\lambda^*, x') e^{i\lambda x'} & \text{Im } \lambda < 0 \end{cases} \quad (7.28)$$

由式 (3.87) 可知，函数 $\Psi(\lambda, x')$ 在过实轴 ($\text{Im } \lambda = 0$) 上有一跃变，即

$$\Psi(l) = \Psi(l + i0) - \Psi(l - i0) = R(l) \bar{\alpha}'(l, x') e^{i\lambda x'} \left(R = \frac{b(l)}{a(l)} \right) \quad (7.29)$$

这里 $b(l)$ 等价于式 (3.87) 中的 $b(\lambda)$ 。 $\Psi(\lambda, x')$ 在 λ 或 k 的复数上半平面上的 $a(\lambda_m) = 0$ 点

处有极点。其实，在实轴上的跃变与反射系数 R 有关。为了求出用函数 $\Psi(\lambda, x')$ 表示出的散射数据 $c_n, \lambda_n, R(\lambda)$ 与本征方程式 (3.81) 的解 $\alpha'(\lambda, x')$ 及 $\alpha'(-\lambda, x')$ 的关系，则必须求出沿着上半平面周线的积分

$$i\pi \left(\frac{1}{0} \right) + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\lambda' + i\delta)}{\lambda' - \lambda} d\lambda' = 2\pi i \sum \frac{A_n}{\lambda_n - \lambda} \quad (7.30)$$

$$A_n = c_n \alpha'_n(x') e^{i\lambda_n x'}, \quad c_n = \frac{\tilde{c}_n}{a'(\lambda_n)}, \quad \alpha'(\lambda_n) = \frac{da(\lambda)}{d\lambda} \Big|_{\lambda=\lambda_n}$$

如果从 λ' 的复平面的下半平面进行积分，可得

$$i\pi \left(\frac{1}{0} \right) - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Psi(\lambda' - i\delta)}{\lambda' - \lambda} d\lambda' = 2\pi i \overline{\alpha'}(\lambda^*, x) e^{i\lambda x'} \quad (7.31)$$

由式 (7.29)、式 (7.30) 和式 (7.31)，在 $\text{Im } \lambda > 0$ 时有

$$\overline{\alpha'}(\lambda^*, x) e^{i\lambda x'} = \left(\frac{1}{0} \right) + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R(\lambda') \alpha(\lambda', x')}{\lambda' - \lambda} e^{i\lambda x} d\lambda' - \sum_n^N \frac{c_n \alpha'_n(x')}{\lambda_n - \lambda} e^{i\lambda_n x'} \quad (7.32)$$

若求式 (7.32) 的复数共轭，则应把 λ^* 改为 λ ，则可得到在 $\text{Im } \lambda > 0$ 时的方程，若再做变换

$$\bar{\psi} = \begin{pmatrix} \psi_2^* \\ \psi_1^* \end{pmatrix} = i\sigma_2 \psi^*, \quad i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

并注意 $\frac{1}{(\alpha')} = -\alpha'$ ，在 $\text{Im } \lambda > 0$ 时可求得

$$\begin{aligned} \alpha'_1(\lambda, x') e^{i\lambda x'} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{R^*(\lambda') \alpha_2^*(\lambda', x')}{\lambda' - \lambda} e^{-i\lambda' x'} d\lambda' + \sum_{n=1}^N \frac{c_n^* \alpha_{n2}^{*'}(x')}{\lambda_n^* - \lambda} e^{-i\lambda_n^* x'} \\ \alpha'_2(\lambda, x') e^{-i\lambda x'} &= 1 - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{R^*(\lambda') \alpha_2^*(\lambda', x')}{\lambda' - \lambda} e^{-i\lambda' x'} d\lambda' - \sum_{n=1}^N \frac{c_n^* \alpha_{n1}^{*'}(x')}{\lambda_n^* - \lambda} e^{-i\lambda_n^* x'} \end{aligned} \quad (7.33)$$

在此方程式中，代入 $\lambda = l + i\delta$ 及 $\lambda = \lambda_m$ ($m = 1, 2, \dots, N$)，则可得到了联系散射数据 $a(l, 0)$, $b(l, l)$, $\tilde{c}_x(l)$ 与 ZS 型方程式 (3.85) 的解 $\chi_1(l, x')$, $\chi_2(l, x')$, $\chi_{m1}(x')$, $\chi_{m2}(x)$ 的 $2N+1$ 个方程。则在方程式 (3.84) 中的势 $q(x', t')$ 就可以从这些波函数在 $|\lambda| \rightarrow \infty$ 时的高阶极限下的渐近行为求出。现把 χ_1 , χ_2 分别假定为

$$\chi_1 = f_1 e^{i\lambda x'}, \quad \chi_2 = f_2 e^{i\lambda x'} \quad (7.34)$$

则由式 (3.84) 可得

$$f_{1x'} + 2i\lambda f_1 = qf_2, \quad f_{2x'} = -q^* f_1 \quad (7.35)$$

从式(3.84b), 因在 $x' \rightarrow \infty$ 处可得到 $\alpha'_1 \rightarrow 0$ 及 $\alpha'_2 \rightarrow e^{i\lambda x'}$ 。于是在 $x' \rightarrow \infty$ 时有 $f_1 \rightarrow 0$ 和 $f_2 \rightarrow 1$ 。则在 $|\lambda| \ll 1$ 时, 可把 f_1 及 f_2 按 λ^{-n} 展开为

$$\begin{cases} f_1 = \lambda^{-1} f_1^{(1)} + \lambda^{-2} f_1^{(2)} + \dots \\ f_2 = 1 + \lambda^{-1} f_2^{(1)} + \lambda^{-2} f_2^{(2)} + \dots \end{cases}$$

将它代入式(7.35), 逐次求出展开系数, 则可得

$$f_1^{(1)} = \frac{1}{2i} q, \quad f_2^{(1)} = \frac{1}{2i} \int_{x'}^{+\infty} |q|^2 dx''$$

于是式(7.34)变成

$$\alpha' e^{-i\lambda x'} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2i\lambda} \left(\int_{x'}^{+\infty} |q|^2 dx'' \right) + \dots \quad (7.36)$$

另一方面, 将式(7.33)的右边同样按 λ^{-n} 展开, 并与式(7.36)比较, 可得

$$q = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R^*(\lambda') \alpha_2'^*(\lambda, x') e^{-i\lambda' x} d\lambda' - 2i \sum_n c_n^* \alpha_{n2}'^* e^{-i\lambda_n^* x'} \quad (7.37)$$

$$\int_{x'}^{+\infty} |q|^2 dx'' = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\lambda') \alpha_1(\lambda', x') e^{i\lambda' x'} d\lambda' - 2i \sum_n c_n \alpha_n e^{i\lambda_n x'} \quad (7.38)$$

现在定义

$$K_1(x', y) = i \sum_{n=1}^N c_n^* \alpha_{n2}'^* e^{-i\lambda_n^* y} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R^*(\lambda) \alpha_2'^*(\lambda, x') e^{-i\lambda y} d\lambda \quad (7.39)$$

$$K_2(x', y) = -i \sum_{n=1}^N c_n^* \alpha_{n1}'^* e^{-i\lambda_n^* y} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R^*(\lambda) \alpha_1'^*(\lambda, x') e^{-i\lambda y} d\lambda$$

则由式(7.33)有

$$\int_x^{+\infty} K_1(x', y) e^{i\lambda y} dy = \chi_1(\lambda, x')$$

$$\int_x^{+\infty} K_2(x', y) e^{i\lambda y} dy = \chi_2(\lambda, x') - e^{i\lambda x'}$$

现引入以上由散射数据给出的函数

$$B(x' + y, t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\lambda, t') e^{i\lambda(x'+y)} d\lambda - i \sum_{n=1}^N C_n e^{i\lambda_n'(x'+y)}$$

则从以上积分核 $K_1(x', y)$ 及 $K_2(x', y)$ 就得到所要求的 G-L-M 方程

$$K_1(x', y, t') = B^*(x' + y, t') + \int_{x'}^{+\infty} B^*(y + x', t') K_2^*(x', z, t') dz \quad (7.40)$$

$$K_2^*(x', y, t) = - \int_x^{+\infty} B(y + z, t) K_1(x', z, t) dz$$

的解[这可把式(7.32)和式(7.33)代入上式加以验证]。另外, 若将式(7.39)与式(7.37)

和式(7.38)进行比较,则 $q(x',t')$ 及 $\int_{x'}^{+\infty} |q|^2 dx''$ 可分别用GLM方程式(7.40)的解 $K_1(x',x')$ 及 $K_2(x',x')$ 表示为

$$q(x',t') = -2K_1(x',x'), \quad \int_x^{+\infty} |q|^2 dx' = -2K_2^*(x',x')$$

若要求一单孤子解,则有 $R(k)=0$ 和 $N=1$,于是方程式(7.33)变成

$$\begin{cases} \alpha'_1 e^{-i\lambda_1 x'} = c_1^* \alpha_2'^* e^{-i\lambda_1^* x} / (\lambda_1^* - \lambda_1^3) \\ \alpha_2' e^{-i\lambda_1 x'} = 1 - \frac{c_1^* \alpha_1'^* e^{-i\lambda_1^* x}}{(\lambda_1^* - \lambda_1)} \end{cases} \quad (7.41)$$

由式(7.37)可知, $q(x',t')$ 仅是 α_2' 的函数。因此,如果从式(7.41)消去 α_1' ,并利用式(3.92)和式(7.38),便可得到

$$c_1^* \alpha_2'^* e^{-2i\lambda_1^* x'} = \frac{R^* e^{-4i(l^2 - \lambda^2)t' - 2il\lambda}}{|R|(2\lambda)^{-2} e^{-8i\lambda t' - 2\lambda x'} + e^{8i\lambda t' + 2\lambda x'}}$$

式中, $\lambda_1 = l + i\lambda$ 及 $R = \tilde{c}_1(0)/a'(\lambda_1)$ 。把它代入式(7.37),利用 q 与 ϕ 之间的关系式(3.84)可求出式(3.155)解 $\phi(x',t')$ 便是式(3.95)。

7.3.2 具有初始条件的反散射方法

由 $\hat{L}\Psi = k\Psi$ 和式(3.81)决定的方程式满足 Zakharov-Shabat 方程式(3.84)或式(3.28),现这里用 $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ 代替 $u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$, λ 用 ξ' 代替。于是这里有 $q = \frac{i\phi}{\sqrt{1-s^2}}$, $\xi' = \frac{ks}{1-s^2}$, $b = \frac{2}{1-s^2}$, $x' = x\sqrt{2m/\hbar}$, $t' = t/\hbar$, b 是式(3.2)中的非线性作用系数,其特征值 $\zeta = \xi' + i\eta$ 。Zakharov-Shabat 方程现改写成

$$\tilde{\psi}_{1x'} = -\frac{q_{x'}}{q} \tilde{\psi}_{1x'} + \tilde{\psi}_1 \left(\xi'^2 + |q|^2 - i\xi' \frac{q_{x'}}{q} \right) = 0 \quad (7.42)$$

$$\tilde{\psi}_2 = \frac{1}{q} [\tilde{\psi}_{1x'} + i\xi' \tilde{\psi}_1] \quad (7.43)$$

这里 $\psi_1 = \sqrt{1-se^{-i\lambda x'/(1-s^2)}} \tilde{\psi}_2$, $\psi_2 = \sqrt{1+se^{-i\lambda x'/(1-s^2)}} \tilde{\psi}_1$ 。根据反散射方法,现必须求出式(7.43)的解。对于一个给定的 $q(x')$ 和实数 $\varsigma = \xi'$,则有

$$\lim \tilde{\psi}(\xi', x') = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi' x'} & \text{如果 } x' \rightarrow -\infty \\ a(\xi') \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi' x'} - b(\xi') \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\xi' x'} & \text{如果 } x' \rightarrow \infty \end{cases} \quad (7.44)$$

其系数 $a(\xi')$ 和 $b(\xi')$ 是复数, 并满足式 (3.87)。

如前所述, $1/a(\xi')$ 决定了入射到势函数 $q(x')$ 的平面波在 x' 的传输系数, 其比值 $R(\xi') = b(\xi')/a(\xi')$ 是入射平面波的反射系数, 而由式 (7.44) 决定的函数在 ξ' 的复平面的上半平面 ($\eta > 0$) 上处处解析连续。应用反散射方法, 可从 $t' = 0$ 时的 $a(\xi')$ 和 $b(\xi')$ 值通过关系

$$a(\varsigma, t') = a(\varsigma), \quad b(\varsigma, t') = b(\varsigma) e^{4i\varsigma^2 t'} \quad (7.45)$$

决定在 $t' \neq 0$ 时的 $a(\xi')$ 和 $b(\xi')$ 的值。如果 $a(\varsigma)$ 在 ς 的复平面的上半平面趋于零, 则 ς_j 和 $\tilde{\psi}(\varsigma_j, x')$ 的渐近值可表示成

$$\tilde{\psi}(\varsigma_j, x') = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{(\eta_j - i\xi'_j)x'} & x' \rightarrow \infty \\ b(\varsigma_j) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-(\eta_j - i\xi'_j)x'} & x' \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (j=1, 2, \dots, N) \quad (7.46)$$

对于 $\eta_j \neq 0$, $\tilde{\psi}(\varsigma_j, x')$ 在 $|x'| \rightarrow \infty$ 时逐渐减少到零。因此, 它描述了一个由式 (3.85) 或由式 (7.42) ~ 式 (7.43) 决定的复数 ς_j 对应的束缚态, 其中 $c_j(t')$ ($j=1, 2, \dots, N$) 由下式决定:

$$c_j(t') = b(\varsigma_j, x') \left[\frac{\partial a(\varsigma)}{\partial \varsigma} \right]_{\varsigma=\varsigma_j}^{-1} = \frac{ib}{2} e^{4i\varsigma_j^2 t'} \quad (7.47)$$

并定义函数

$$R(\xi', x') = \frac{b(\xi', t')}{a(\xi')}$$

它们形成了一组散射数据。从这些数据 Davydov 得到了以下的辅助函数:

$$F(x', t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\xi', x') e^{i\xi' x'} d\xi' + \sum_{j=1}^N c_j(t') e^{i\varsigma_j x'} \quad (7.48)$$

将式 (7.48) 代入 Gel'fand-Levitan-Marchenko (GLM) 方程, 可得

$$K(x', y') = F^*(x' + y', t') - \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-x'}^{+\infty} F^*(p + y', t') F(p + z, t') K(x', t') dz \quad (7.49)$$

此式类似于式 (7.40)。则所要求的波函数 $\phi(x', t')$ 便可以从式 (7.46) 所决定的 $K(x', x')$ 通

过公式

$$q(x', t') = -2K(x', x') \quad (7.50)$$

求出。

7.3.3 具有初始值的非线性Schrödinger方程的求解

在初始值为 $\phi(x', 0)$ 的条件下, 满足非线性Schrödinger方程式(3.155)的解便可表示成

$$\phi(x', t') = -\frac{i\sqrt{2}q(x', t')}{\sqrt{b}} \quad (7.51)$$

使用前面的反散射方法和如下初始条件

$$\phi(x', t' = 0) = \frac{1}{2\sqrt{2}} \sqrt{b} e^{2ikx'} \operatorname{sech}\left(\frac{bx'}{2}\right) \quad (7.52)$$

Davydov 得到了非线性 Schrödinger 方程式(3.155)的解, 这里 $2k = m_{\text{ex}} r_0 v / \hbar$, 其中 r_0 是

晶格常数, m_{ex} 和 v 是粒子的有效质量和速度。在此情况下, 为了得到散射数据, 必须求出在初始值为

$$q(x', 0) = i\sqrt{\frac{b}{2}} \phi(x', 0) = \frac{ib}{4} e^{2ikx'} \operatorname{sech}\left(\frac{bx'}{4}\right) \quad (7.53)$$

时的式(7.42)和式(7.43)的渐近解。如果 $|x'| \rightarrow \infty$, 则式(7.42)变为

$$\tilde{\psi}_1'' - \left(2ik \pm \frac{b}{4}\right) \tilde{\psi}_1' + \varsigma \left(\varsigma - k \mp \frac{ib}{2}\right) \tilde{\psi}_1 = 0 \quad (7.54)$$

这里 $\tilde{\psi}' = d\tilde{\psi}/dx'$, 在此式中的“ \mp ”分别相应于 $x' \rightarrow -\infty$ 和 $x' \rightarrow +\infty$ 时的解。式(7.54)的解有

$$\tilde{\psi}_1 \rightarrow \begin{cases} e^{[i(k+m_1)+b/4]x'} & x' \rightarrow -\infty \\ e^{[i(k-m_2)-b/4]x'} & x' \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (7.55)$$

式中,

$$m_1 = \varsigma + k - i\frac{b}{4}, \quad m_2 = \varsigma + k + i\frac{b}{8}$$

当 $b \neq 0$ 时, 式(7.55)与 $\varsigma_1 = \xi'_1 + i\eta_1$, $\xi'_1 = -k$, $\eta_1 = b/8$ 时的式(7.44)相同。从式(7.44)可求出在 $x' \rightarrow \infty$ 时的 $\tilde{\psi}_2(\xi') = b(\xi') e^{i\xi't'}$ 。但式(7.55)和式(7.43)意味着 $\tilde{\psi}_2(\infty) = 0$ 。因此, 对于势函数式(7.53), 则 $b(\xi')$ 和 $R(\xi')$ 必须为零。这样的“势函数”称为非反散

射势。它不能从无穷远进入的平面波的散射来观察到。在这种情况下，式(7.47)的谱系数为

$$R(\xi', t') = 0, \quad \varsigma_1 = -k + i\frac{b}{8}, \quad c_1(t') = c_0 e^{4i\varsigma_1^2 t'}$$

这里 $c_0 = ib/4$ ，则 $F(x', t') = c_1(t') e^{i\varsigma_1^2 x'}$ 。将此式代入式(7.49)，可得

$$K(x', y') = f(x') e^{-i\varsigma_1^2 y'}$$

于是有

$$f(x') = c_1^*(t') e^{-i\varsigma_1^2 x'} \left[1 + \frac{16|c_1(t')|^2}{b^2} e^{-bx'/2} \right]^{-1}$$

则同式(7.50)的 $q(x', y')$ 相关的波函数 ϕ 的模的平方就能表示为

$$|\phi(x', t')|^2 = \frac{2}{b} |q(x', t')|^2 = \frac{b}{8 \cosh \{ 2 [b(x' - x'_0 - 4kt')/4] \}} \quad (7.56)$$

式中，

$$x'_0 = \frac{4}{b} \ln \left(\frac{4|c_0|}{b} \right) = 0$$

这表明在初始脉冲值为式(7.53)和 $b \neq 0$ 时，由非线性薛定谔方程描述的微观粒子，在时空中以一个给定速度 k 做孤子运动。

如果初始状态具有如下矩形形状：

$$\phi(x', 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{l}} e^{2ikx'} & 0 \leq x' \leq l \\ 0 & x' < 0 \text{ 和 } x' > l \end{cases} \quad (7.57)$$

则式(3.84)或式(7.42)～式(7.43)的解可写成

$$\begin{aligned} \tilde{\psi} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\varsigma x'} & \text{对于 } x' < 0 \\ \tilde{\psi} &= a(\varsigma) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\varsigma x'} + b(\varsigma) e^{i\varsigma x'} & \text{对于 } x' > l \end{aligned}$$

在 $0 \leq x' \leq l$ 的范围内，则有

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_1 &= [A_1 \sin nx' + A_2 \cos nx'] e^{ikx'} \\ \tilde{\psi}_2 &= \frac{1}{Q_0} \{ [(\varsigma + k) A_1 + in A_2] \sin nx' + [(\varsigma - k) A_2 - in A_1] \sin nx' \} e^{-ikx'} \end{aligned}$$

和

$$Q_0 \equiv \sqrt{bl}, \quad n^2 \equiv Q_0^2 - (\varsigma - k)^2$$

从解的连续性条件可得到

$$A_1(\zeta) = -i \frac{k - \zeta}{n}, \quad A_2 = 1$$

$$a(\zeta) = \frac{1}{n} S(\zeta, k) e^{i(k+\zeta)t'}, \quad b(\zeta) = \frac{i}{n} Q_0 e^{-i(k+\zeta)t'} \quad (7.58)$$

式中, $S(\zeta, k) = n \cos(nl) - i(k + \zeta) \sin(nl)$

则从以上 $R(\xi')$ 的定义和式(7.58)便可得到在 $t' = 0$ 时的反散射系数为

$$R(\xi') = i Q_0 S^{-1}(\xi', k) e^{-2i(k+\xi')l}$$

根据式(7.46), 在时间 $t' \neq 0$ 时的反散射系数可表示成

$$R(\xi', t') = R(\xi') e^{4i\xi'^2 t'} \quad (7.59)$$

则束缚态的参数可以从 $S(\zeta, k) = 0$ 得到, 此方程的解为 $\zeta_0 = -k + i\eta_0$, 这里 η_0 由 $l\eta_0 = -\sqrt{bl/2 - l^2\eta_0^2} \cot \sqrt{bl/2 - l^2\eta_0^2}$ 决定。如果 $\eta_0 \neq 0$ 时, 可以从式(7.46)、式(7.47)和式(7.58)得到, 为

$$c_0(t') = \tilde{\alpha} e^{4i\zeta_0^2 t'} \quad (7.60)$$

式中,
$$\tilde{\alpha} \equiv \frac{n_1^2 e^{2l\eta_0}}{Q_0 [n_1 l \cos(n_1 l) - \sin(n_1 l)]}, \quad n_1^2 = Q_0^2 - \eta_0^2$$

于是利用式(7.58)和式(7.60), 再由式(7.48)决定的 $F(x', t')$ 可表示成

$$F(x', t') = c_0(t') e^{i\zeta_0 x'} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} R(\xi', t') e^{i\xi' x'} d\xi' \quad (7.61)$$

此处的 $c_0(t')$ 和 $R(\xi', t')$ 是由式(7.60)和式(7.59)决定的。在式(7.61)中的第一项表示了孤子解, 而第二项表示了一个伴随该孤子的“尾巴”。

在经过充分长的时间后, 对式(7.61)的积分可近似表示为

$$\frac{1}{2\pi} \int R(\xi', t') e^{i\xi' x'} d\xi' \approx \frac{i\sqrt{b}}{4\sqrt{2}t'\pi l S(0, k)} \exp \left\{ -i \left[\frac{(x' - 2l)^2}{16t'} + 2 \left(kl - \frac{\pi}{8} \right) \right] \right\}$$

这个“尾巴”随时间以 $1/\sqrt{t'}$ 的形式减少, 则在充分长时间的极限下, 可仅保留式(7.61)的第一项。于是, Davydov 从解式(7.49)求 $K(x', y')$, 最后得到在初始条件式(7.57)下, 非线性 Schrödinger 方程式(3.155)的解为

$$\phi_s(x', t') = \frac{i2\sqrt{2}\eta_0 \exp \left\{ 2i \left[kx' - 2(k^2 - \eta_0^2)t' \right] \right\}}{\sqrt{b} \cosh \left[2\eta_0 (x' - x_0 - 4kt') \right]} \quad (7.62)$$

式中, $x_0' = \frac{1}{2\eta_0} \ln \frac{|\tilde{\alpha}|}{2\eta_0}$ 。

由此得出, 只要非线性参数 b 大于一个临界值 $b_{cr} = \pi^2/4l$ 时, 在上述初始条件下也有一个孤子解存在, 其孤子的振幅和它的宽度随时间 b 的增加而减少。

7.4 基于反散射变换的微扰方法

7.4.1 基本的求解办法

按照以上的反散射方法, 要解决此问题, 首先要寻找 Lax 算符 \hat{B} 和 \hat{L} 及散射数据。其中的第一步就是从式 (3.81) 的 $\hat{L}\Psi = k\Psi$ 求出它的本征函数和本征值。由于 \hat{L} 的系数依赖于非线性 Schrödinger 方程的解 $\phi(\vec{r}, t)$, 于是散射数据与 $\phi(\vec{r}, t)$ 有关。而散射数据又分为由连续部分的 $S(\lambda)$ 和分离部分的 S_n 组成, 其中 n 表示了分立本征值的编号, 从 $\Psi_t = \hat{B}\Psi$ 方程给出了散射数据随时间的变化。于是, $S(\lambda)$ 和 S_n 的时间演变可分别表示成

$$\frac{\partial S(\lambda, t)}{\partial t} = i\Omega(\lambda)S(\lambda, t), \quad \frac{dS_n(t)}{dt} = \Omega_n S_n(t) \quad (7.63)$$

为了求解非线性 Schrödinger 方程, 应首先决定相应于初始条件 $\phi(x, t=0)$ 的初始散射值 $S(\lambda, t=0)$ 和 $S_n(t=0)$ 。其次从式 (7.63) 求出 $S(\lambda, t)$ 和 $S_n(t)$, 最后从 $S(\lambda, t)$ 和 $S_n(t)$ 用反散射法重构出解 $\phi(\vec{r}, t)$, 其分立的谱数据对应于孤子解, 而连续的谱散射数据对应于辐射。在这种方法中, 其变分 $\delta S/\delta\phi(\vec{r})$ 能够从 Jost 函数和散射数据得到。在一维情况时使用这些量, 可以得到微扰非线性 Schrödinger 方程

$$i\phi_t + \phi_{x'x'} + 2|\phi|^2\phi = \varepsilon P[\phi] \quad (7.64)$$

相应的散射数据随时间变化。这里, $P[\phi]$ 表示其微扰作用, $x' = \sqrt{2m/\hbar^2}x$ 和 $t' = t/\hbar$ 。Kivshar 等人求得了在此种情况下的散射谱参数的变化为

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(\lambda, t')}{\partial t'} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta S(\lambda, t')}{\delta\phi(x', t')} F[\phi] dx' + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta S(\lambda, t')}{\delta\phi(x', t')} P[\phi] dx' \\ &= i\Omega(\lambda)S(\lambda, t') + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta S(\lambda, t')}{\delta\phi(x', t')} P[\phi] dx' \end{aligned} \quad (7.65)$$

$$\text{和} \quad \frac{\partial S_n(\lambda, t')}{\partial t'} = \Omega_n S_n(t') + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\delta S_n(t')}{\delta\phi(x', t')} P[\phi] dx' \quad (7.66)$$

这里 $F[\phi] = -\phi_{x'x'} - 2|\phi|^2\phi$ 是式 (7.64) 中的未微扰部分。当 ε 很小时, 将未微扰解 $\phi(x', t')$ 和 Jost 函数代入式 (7.65) 的右边, 便可得到散射数据的微扰演化方程的最低阶近似方程, 再通过迭代可得到高阶近似值。这种方法是由 Kaup, Karpman, Maslov 和 Kivshar 与 Malomed 等发展。对于式 (7.64), 未受微扰的 \hat{L} 和 \hat{B} 现分别表示为

$$\hat{L} = \begin{bmatrix} -i\frac{\partial}{\partial x'} & \phi^*(x') \\ -\phi(x') & -i\frac{\partial}{\partial x'} \end{bmatrix} \quad (7.67)$$

$$\hat{B} = \begin{bmatrix} -4i\lambda^3 + 2\lambda|\phi|^2 + \phi^*\phi_{x'} - \phi\phi_{x'}^* & -4i\lambda^2\phi^* - 2i\lambda\phi_{x'}^* + i\phi_{x'x'}^* + 2i\phi^{*2}\phi \\ -4i\lambda^2\phi + 2i\lambda\phi_{x'} + i\phi_{xx'} + 2i\phi^2\phi^* & 4i\lambda^3 - 2\lambda|\phi|^2 - \phi_x\phi^* + \phi^*\phi_x \end{bmatrix} \quad (7.68)$$

7.4.2 具体的求解过程

对于实谱参数的 Jost 函数在边界时的表示可写成

$$\Psi_{\pm}(x', \lambda) = e^{i\lambda\sigma_3 x'} + O(1) \quad \text{当 } x' \rightarrow \pm\infty \text{ 时} \quad (7.69)$$

这里 σ_3 是泡利矩阵。这个 Jost 函数的矩阵形式可表示成 $\Psi_+ = (\psi', \bar{\psi})$, $\Psi_- = (-\bar{u}, u')$,

这里 ψ' 和 u' 是独立的矢量柱。线性对称算符作用在 $\psi' = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}$ 上后变成了 $\bar{\psi} = \begin{bmatrix} -\psi_2^* \\ \psi_1 \end{bmatrix}$ 。

通过单值矩阵 T 使 Ψ_+ 和 Ψ_- 相关, 其关系为

$$\Psi_-(x', \lambda) = \Psi_+(x', \lambda)T(\lambda)$$

Kivshar 等人给出了这个矩阵为

$$T(\lambda) = \begin{bmatrix} a^*(\lambda) & b(\lambda) \\ -b^*(\lambda) & a(\lambda) \end{bmatrix} \quad (7.70)$$

其中两个 Jost 系数 $a(\lambda)$ 和 $b(\lambda)$ 满足

$$|a(\lambda)|^2 + |b(\lambda)|^2 = 1 \quad (7.71)$$

矢量 Jost 函数 $\psi'(x', \lambda)$ 和 $u'(x', \lambda)$ 与 Jost 系数 $a(\lambda)$ 在谱参数 λ 的上半平面上是连续的, 函数 $a(\lambda)$ 在上半平面上的零点 $\lambda_n = \xi_n + i\eta_n (n=1, 2, \dots)$ 给出了相应于线性问题式 (3.83) 的分立谱。而 Jost 函数 $\psi'(x', \lambda_n)$ 和 $u'(x', \lambda_n)$ 是线性依赖的, 即 $u'(x', \lambda_n) = b_n \psi'(x', \lambda_n)$ 。当 $|x'| \rightarrow \infty$ 时, 其指数衰减到零, 具有实数 λ 的 $a(\lambda)$ 和 $b(\lambda)$ 组成了连续谱的数据, 而复数 λ_n 和 b_n 组成了分立谱散射数据, 它们的时间演变由式 (7.68) 中的 \hat{B} 算符的线性方程决定, 可表示为

$$\begin{aligned} a(\lambda, t') &= a(\lambda, 0), & b(\lambda, t') &= b(\lambda, 0)e^{4i\lambda^2 t'} \\ \lambda_n(t') &= \lambda_n(0), & b_n(t') &= b_n(0)e^{4i\lambda_n^2 t'} \end{aligned} \quad (7.72)$$

在式 (7.67) 中的算符 \hat{L} 的反散射问题简化为下面的奇异积分方程式:

$$\tilde{\psi}(x', \lambda) e^{i\lambda x'} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \sum_{n=1}^N \frac{b_n \psi(x', \lambda_n) e^{i\lambda_n x'}}{(\lambda - \lambda_n) a'(\lambda_n)} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{r(\lambda') \psi(x', \lambda') e^{i\lambda' x'}}{\lambda' - \lambda + i0} d\lambda' \quad (7.73)$$

$$\tilde{\psi}(x', \lambda_n) e^{i\lambda_n^* x'} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \sum_{m=1}^N \frac{b_m \psi(x', \lambda_m) e^{i\lambda_m x'}}{(\lambda_n^* - \lambda_m) a'(\lambda_m)} + \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{r(\lambda) \psi(x', \lambda) e^{i\lambda x'}}{\lambda - \lambda_n^*} d\lambda \quad (7.74)$$

$$\text{式中,} \quad a'(\lambda_n) \equiv \left. \frac{\partial a(\lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\lambda=\lambda_n}, \quad r(\lambda) \equiv \frac{b(\lambda)}{a(\lambda)} \quad (7.75)$$

利用这些散射数据和解式(7.73)及式(7.74)可得到 $\phi(x, t)$ 为

$$\phi^*(x', t') = -2 \sum_{n=1}^N \frac{b_n}{a'(\lambda_n)} \psi_1(x', \lambda_n) e^{i\lambda_n x'} + \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} r(\lambda) \psi_1(x', \lambda) e^{i\lambda x'} dx' \quad (7.76)$$

对于在 $b(\lambda) = 0$ 的无反射“势函数”， $\phi(x', t')$ 是无微扰非线性 Schrödinger 方程的孤子解，对于函数 $a(\lambda)$ 的单一零点 $\lambda_1 = \xi' + i\eta$ 的散射数据对应于单孤子解式(3.95)或式(7.62)解的情况。

对于像式(7.64)这样的微扰方程，在最低阶近似下，其演化方程式(7.66)和式(7.65)现在可表示成

$$\frac{\partial a(\lambda, t')}{\partial t'} = \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} P[\phi] u_1(x', \lambda) u_2(x', \lambda) dx' + \varepsilon^* \int_{-\infty}^{+\infty} P^*[\phi] \psi_2(x', \lambda) u_1(x', \lambda) dx' \quad (7.77)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial b(\lambda, t')}{\partial t'} &= 4i\lambda^2 b(\lambda) + \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} P[\phi] \psi_1(x', \lambda) u_2^*(x', \lambda) dx' - \\ &\quad \varepsilon^* \int_{-\infty}^{+\infty} P^*[\phi] \psi_2(x', \lambda) u_1^*(x', \lambda) dx' \end{aligned} \quad (7.78)$$

$$\begin{aligned} \frac{d\lambda_n}{dt'} &= -\frac{1}{a'(\lambda_n)} \times \\ &\quad \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \varepsilon P[\phi] \psi_1(x', \lambda_n) u_2(x', \lambda_n) + \varepsilon^* P^*[\phi] \psi_2(x', \lambda_n) u_1(x', \lambda_n) \right\} dx' \end{aligned} \quad (7.79)$$

$$\frac{db_n}{dt'} = 4i\lambda_n^2 b_n + \frac{b_n}{a'(\lambda_n)} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ P[\phi] Q_1(x', \lambda_n) + \varepsilon^* P^*[\phi] Q_2(x', \lambda_n) \right\} dx' \quad (7.80)$$

$$\text{式中, } Q_i(x', \lambda_n) \equiv \left. \frac{\partial}{\partial \lambda} [u_i(x', \lambda_n) \psi_i(x', \lambda) - u_i(x', \lambda) \psi_i(x', \lambda_n)] \right|_{\lambda=\lambda_n} \quad i = 1, 2 \quad (7.81)$$

式中， $a'(\lambda_n)$ 是用式(7.75)来表示的。对于非线性 Schrödinger 方程式(7.64)的单孤子解式(3.79)的参数时间进展，则为

$$\frac{d\eta}{dt'} = -\frac{1}{3} R \left\{ \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} P[\phi_s(\tilde{y})] e^{2i\varepsilon' x' + i\theta} \operatorname{sech} \tilde{y} d\tilde{y} \right\} \quad (7.82)$$

$$\frac{d\xi'}{dt'} = \frac{1}{2}J \left\{ \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} P[\phi_s(\tilde{y})] \frac{\tanh \tilde{y}}{\cosh \tilde{y}} e^{2i\xi'x' + i\theta} d\tilde{y} \right\} \quad (7.83)$$

$$\frac{d\varsigma'}{dt'} = -4\varsigma' - \frac{1}{4\eta^2}R \left\{ \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\tilde{y}P[\phi_s(\tilde{y})]}{\cosh \tilde{y}} e^{2i\xi'x' - i\theta} d\tilde{y} \right\} \quad (7.84)$$

$$\frac{d\theta}{dt} = 4(\xi'^2 - \eta^2) + \frac{1}{2\eta}J \left\{ \varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} P[\phi_s(\tilde{y})] \frac{1 - 2\eta x' \tanh \tilde{y}}{\cosh \tilde{y}} e^{2i\xi'x' - i\theta} d\tilde{y} \right\} \quad (7.85)$$

这里 $\varsigma' = -4\xi't' + x'_0$, $\theta = 4(\xi'^2 - \eta^2)t' + \theta_0$ 。应用这些公式, 只要知道微扰 $P[\phi]$ 的具体形式, 就可求出散射数据的时间演变和相应方程式 (7.64) 的解。

例如, 既具有耗散又具有外加周期势的微扰: $P(\phi) = -i\alpha\phi + \varepsilon \exp(i\Omega t')$ (这里, Ω 是外加场的频率), Kaup 按照上述方法求得了微扰后的孤子解为

$$\phi(x', t') = 2i\eta(t') \frac{\exp[i\Omega t' - i\theta'(t')]}{\cosh[2\eta(t')x']} \quad (7.86)$$

这里 $\theta'(t')$ 是相位。式 (7.82) 和式 (7.85) 现在可简化为一个自给的动力学系统

$$\frac{d\eta}{dt'} = -2\alpha\eta + \frac{1}{2}\pi\varepsilon \sin\theta, \quad \frac{d\theta'}{dt'} = \Omega - 4\eta^2 \quad (7.87)$$

它们具有两个稳定点, 即

$$\eta_n = \frac{1}{2}(-1)^n \sqrt{\Omega}, \quad \theta'_n = n\pi + \theta'_0 \quad n = 0, 1 \quad (7.88)$$

这里 $\sin\theta'_0 = 2\alpha\sqrt{\Omega}/\pi\varepsilon$ 。从 θ'_0 的表示式得出, 假如外加力大于其阈值 $f_{\text{thr}} = 2\alpha\sqrt{\Omega}/\pi$ 时, 存在一个稳定的孤子解, 其频率与外加场力有关。

7.5 微扰求解法

所谓微扰就是粒子所受到的作用势和非线性相互作用 b 相比较小时, 可以把它看成是一种微弱扰动来处理。这种方法在非线性量子力学中的应用非常广泛, 同时也十分实用。很多人已经或正在广泛使用这种方法求其解。如第 3 章所述, 其方法有线性 and 结构微扰法两种。所谓线性微扰法就是假设微扰方程的解可表示为 $\phi = \phi_0 + \varepsilon\phi_1 + \varepsilon^2\phi_2 + \cdots$ 的形式, 但仅用 $\phi = \phi_0 + \varepsilon\phi_1$ 或 $\phi_0 + \phi_1$ 代入原方程求其解。其时, 仅将微扰效应计算到一阶线性部分的 ϕ_1 。所谓结构微扰法就是它的包络部分和载波部分在微扰作用下都将被改变, 于是把微扰后的解设为 $\phi = \phi' e^{i\theta'(x,t)}$ 代入微扰方程, 利用无微扰解及其特点求出此式中的 ϕ' 和 $\theta'(x,t)$ 的值。其时其解的形式发生了重大变化。现

以非线性 Schrödinger 方程为例来分别阐明这些方法。此方法已在式 (3.77) 和式 (3.78) 中介绍过, 这里不再描述。下面着重介绍线性微扰法。

当式 (3.2) 中的外加势场 $V(x)$ 很小时, 可引用一个小参数 ε 来表示这种微扰效应,

于是, 在 $A(\phi) = 0$ 时的式 (3.2) 变成

$$i \frac{\partial \phi}{\partial t'} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x'^2} + b |\phi|^2 \phi = \varepsilon V(x') \phi \quad (7.89)$$

这里 $t' = t/\hbar$, $x' = \sqrt{2m/\hbar^2} x$ 。庞小峰等人研究过此时的微扰解, 他设

$$\phi = \phi_0 + \phi' = (f + \varepsilon F) e^{i\theta(x', t')} \quad (7.90)$$

式中, $\phi_0 = f(x', t') e^{i\theta(x', t')}$ 是 $\varepsilon = 0$ 时未受微扰时的已知解, 现将式 (7.90) 代入式 (7.89), 将其中高于二次的项忽略, 于是可得到 F 满足的方程为

$$\begin{aligned} i \frac{\partial F}{\partial t'} + \frac{\partial^2 F}{\partial X'^2} - v^2 [1 - 4 \operatorname{sech}^2(vX')] F + 2v^2 \operatorname{sech}^2(vX') F^* \\ = v \sqrt{\frac{2}{b}} \operatorname{sech}(vX') V(X' + v_e t') \end{aligned} \quad (7.91)$$

这里 $X' = x' - v_e t'$, $v^2 = \frac{1}{4}(v_e^2 - 2v_e v_c) = \frac{v_e^2}{2} \delta$, $\delta = 1 - 2v_e/v_c$, 再设 $vX' = y$, $v^2 t' = \tau$, 并让 $F(y, \tau) = F_1(y, \tau) + iF_2(y, \tau)$, 则式 (7.91) 变成

$$\frac{\partial F_1}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 F_2}{\partial y^2} - (1 - 2 \operatorname{sech}^2 y) F_2 = 0 \quad (7.92)$$

$$\frac{\partial F_2}{\partial \tau} + \frac{\partial^2 F_1}{\partial y^2} = (1 - b \operatorname{sech}^2 y) F_1 = \frac{1}{v} \sqrt{\frac{2}{b}} \operatorname{sech} y V(y, \tau) \quad (7.93)$$

从这两个方程可求出相对于 τ 的方程为

$$\frac{\partial^2 F_2}{\partial \tau^2} + \hat{M}_2 F_2 = A_2(y, \tau), \quad \frac{\partial^2 F_1}{\partial \tau^2} + \hat{M}_1 F_1 = A_1(y, \tau)$$

式中,

$$A_2 = -\frac{v^2}{v_e^2} \sqrt{\frac{2}{b}} \operatorname{sech} y \frac{\partial v}{\partial y}, \quad A_1 = -\frac{1}{v} \sqrt{\frac{2}{b}} \left(2 \operatorname{sech} y \tanh y \frac{\partial V}{\partial y} - \operatorname{sech} y \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right)$$

$$\hat{M}_1 = \frac{d^4}{dy^4} - 2(1 - 4 \operatorname{sech}^2 y) \frac{d^2}{dy^2} - 24 \operatorname{sech}^2 y \tanh y \frac{d}{dy} + (1 + 16 \operatorname{sech}^2 y - 24 \operatorname{sech}^4 y)$$

$$\hat{M}_2 = \frac{d^4}{dy^4} - 2(1 - 4 \operatorname{sech}^2 y) \frac{d^2}{dy^2} - 8 \operatorname{sech}^2 y \tanh y \frac{d}{dy} + 1$$

这里 A_2 具有力的性质的参数, 而 \hat{M}_1 和 \hat{M}_2 满足以下本征方程:

$$\hat{M}_2 g_2(vX') = \left(\frac{\omega}{v^2}\right)^2 g_2(vX') \quad (7.94)$$

$$\hat{M}_1 g_1(vX') = \left(\frac{\omega}{v^2}\right)^2 g_1(vX') \quad (7.95)$$

很容易证明 \hat{M}_1 和 \hat{M}_2 不是厄米算标, 但它们彼此厄米共轭, 即 $\hat{M}_2^+ = \hat{M}_2$ 和 $\hat{M}_1^+ = \hat{M}_1$ 。从式(7.94)和式(7.95)可以求得属于不同本征值的本征函数是彼此正交的, 即

$$\int g_2^*(X', \omega) g_1(X', \omega') dX' = \delta(\omega - \omega')$$

其中, 这些正交波函数的本征值分别为 $\omega = \pm(vk^2 + v^2)$ 和 $\omega = 0$ 。当在 $\omega = 0$ 时, 其 k 取值在 $-\infty < k < \infty$, 则相应的本征函数为

$$g_1(x') = c_1 \operatorname{sech}(vX') \tanh(vX'), \quad g_2(x') = c_2 \operatorname{sech}(vX') \quad (7.96)$$

这里 $c_1 = c_2 = \sqrt{2v}$ 。可证明式(7.96)是式(7.94)和式(7.95)在 $\omega = 0$ 时仅有的局域解。

现求 \hat{M}_2 的级数解。它在 $y \rightarrow \infty$ 时的渐近形式为

$$\hat{M}_2 \rightarrow \frac{d^4}{dy^4} - 2\frac{d^2}{dy^2} + 1 \quad y \rightarrow \infty$$

则 \hat{M}_2 的特征方程为

$$-\frac{\omega^4}{v^4} + k^4 + 2k^2 + 1 = 0$$

或

$$\omega^2 = (v^2 k^2 + v^2)^2$$

现设尝试解为

$$g_2(y, k) = h_a \cos(ky) + h_b \sin(ky) \quad (7.97)$$

将它代入式(7.95), 使用 $\cos(ky)$ 和 $\sin(ky)$ 的线性独立性, 可得到两个独立的方程式, 再设 $z = \tan y$, 则庞小峰求得

$$\begin{pmatrix} N_1 & N_2 \\ -N_2 & N_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_a \\ h_b \end{pmatrix} = 0 \quad (7.98)$$

式中,

$$N_1 = (1 - z^2)^3 \frac{d^4}{dz^4} - 12z(1 - z^2) \frac{d^3}{dz^3} - 2(1 - z^2)(3k^2 + 1 - 14z^2) \frac{d^2}{dz^2} - 4z(3k^2 - 1) \frac{d}{dz} - 8k^2$$

$$N_2 = 4k \left[(1 - z^2)^2 \frac{d^3}{dz^3} - 6z(1 - z^2) \frac{d^2}{dz^2} - (k^2 - 1 - 2z^2) \frac{d}{dz} - 2z \right]$$

现使用么正变化: $S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$, $S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$, 可将式(7.114)变成

$$\begin{pmatrix} N_1 - iN_2 & 0 \\ 0 & N_1 + iN_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_a + ih_b \\ i(h_a - ih_b) \end{pmatrix} = 0 \quad (7.99)$$

此方程等值于两个方程，它们的解可表示为

$$h_a = z^p \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n, \quad h_b = z^r \sum_{m=0}^{\infty} b_m z^m \quad (7.100)$$

则式(7.99)的解通过式(7.100)代入其中即可得到。但为了求出一个有限解，必须将级数解式(7.100)进行截断。可证明仅有一种截断方法是行之有效的，除系数外，这个解为

$$h_a(z) = (k^2 - 1) + 2kz$$

$$h_b(z) = (k^2 - 1) - 2kz$$

于是从式(7.79)可求得解，在 $\omega = 0$ 时它为

$$g_1(x') = c_1 \operatorname{sech}(vX') \tanh(vX'), \quad g_2(x') = c_2 \operatorname{sech}(vX')$$

当 $\omega = \pm(v^2 k^2 + v^2)$ 时，它为

$$\begin{aligned} g_1(X', k) &= \frac{1}{k^2 + 1} \sqrt{\frac{v}{2\pi}} \left\{ [k^2 - 1 + 2k \tanh(vX') + 2\operatorname{sech}^2(vX')] \cos(kvX') + \right. \\ &\quad \left. [k^2 - 1 + 2k \tanh(vX') + 2\operatorname{sech}^2(vX')] \sin(kvX') \right\} \\ g_2(X', k) &= \frac{1}{k^2 + 1} \sqrt{\frac{v}{2\pi}} \left\{ [k^2 - 1 + 2k \tanh(vX')] \cos(kvX') + \right. \\ &\quad \left. [k^2 - 1 + 2k \tanh(vX')] \sin(kvX') \right\} \end{aligned}$$

这里 g_1 和 g_2 满足以下正交归一化条件：

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(X') g_2(X', k) dX' &= 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(X', k) g_2(X', k') dX' = \delta(k - k') \\ \int_{-\infty}^{+\infty} g_1^2(X') dX' &= 2/3, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g_2(X') g_1(X', v) dX' = 0 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} g_2^2(X') dX' &= 2, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} g_1(X', k) g_1(X') dX' = \frac{\pi k}{3\sqrt{2}} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi k}{2}\right) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} g_2(X', k) g_1(X') dX' &= \sqrt{\frac{\pi}{2}} \operatorname{sech}\left(\frac{\pi k}{2}\right) \end{aligned} \quad (7.101)$$

于是，可使用本征函数 g_1 和 g_2 将 F_1 和 F_2 表示为

$$\begin{aligned}
 F_1(y, \tau) &= \varphi_{10}(\tau) g_1(y) + \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{1k}(\tau) g_1(y, k) dk \\
 F_2(y, \tau) &= \varphi_{20}(\tau) g_2(y) + \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_{2k}(\tau) g_2(y, k) dk
 \end{aligned}
 \quad (7.102)$$

应用式(7.101)可得

$$\begin{aligned}
 \hbar \frac{d^2 \varphi_{1k}(\tau)}{d\tau^2} + (k^2 + 1)^2 \varphi_{1k}(\tau) &= A_1(\tau, k) \\
 \hbar \frac{d^2 \varphi_{2k}(\tau)}{d\tau^2} + (k^2 + 1)^2 \varphi_{2k}(\tau) &= A_2(\tau, k)
 \end{aligned}
 \quad (7.103)$$

和

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2 \varphi_{10}(\tau)}{d\tau^2} &= \frac{3}{2} A_1(\tau) - \sqrt{\frac{\pi}{8}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_1(\tau, k) k \operatorname{sech}\left(\frac{\pi k}{2}\right) dk = H_1(\tau) \\
 \frac{d^2 \varphi_{20}(\tau)}{d\tau^2} &= \frac{1}{2} A_2(\tau) + \sqrt{\frac{\pi}{8}} \int_{-\infty}^{+\infty} A_2(\tau, k) k \operatorname{sech}\left(\frac{\pi k}{2}\right) dk = H_2(\tau)
 \end{aligned}
 \quad (7.104)$$

式中,

$$\begin{aligned}
 A_1(\tau) &= \int_{-\infty}^{+\infty} A_1(\tau, y) g_1(y) dy, \quad A_2(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} A_2(\tau, y) g_2(y) dy \\
 A_1(\tau, k) &= \int_{-\infty}^{+\infty} A_1(\tau, y) g_1(y, k) dy, \quad A_2(\tau, k) = \int_{-\infty}^{+\infty} A_2(\tau, y) g_2(y, k) dy
 \end{aligned}$$

从式(7.103)和式(7.104)可知,只要知道外势场 $V(x, t)$ 的具体形式,便可从式(7.103)和式(7.104)求出 $\varphi_{1k}(\tau)$, $\varphi_{2k}(\tau)$, $\varphi_{10}(\tau)$ 和 $\varphi_{20}(\tau)$ 等的具体形式,于是方程式(7.89)的线性微扰解就可求出,从而便可求得具有任何形式的外势场的线性微扰解。从式(7.103)和式(7.104)可以看出,在式(7.104)中的经典模解 $\varphi_{10}(\tau)$ 和 $\varphi_{20}(\tau)$ 具有分立的本征值,满足牛顿型运动方程。在式(7.103)中的 $\varphi_{1k}(\tau)$ 和 $\varphi_{2k}(\tau)$ 具有连续性的本征值,满足波动方程,可称为量子模式。在它们之间存在一个能隙 ΔE ,可求出 $\Delta E = v^2$ 。当系统是被量子化时,量子模式接近于经典模式,能隙为0。于是经典模式消失,量子模式存在。当 $v_e \rightarrow \infty$ 时,经典条件满足,能隙为无穷大,则无量子模式存在。因而由此可以得出,在这种微扰势 $V(x')$ 时,系统既具有量子特性又具有经典特性。

7.6 D 标符和Hirota解法

7.6.1 D 算法及其特点

非线性量子力学的动力学方程的解可用 Hirota 引入的 D 算符来求解。此法本质上就是一个函数变换法。对于一般的非线性动力学方程 $F(D_x^m D_t^n) = 0$, 所使用的 D 算符被定义为

$$D_x^m D_t^n (f, g) = \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \right)^m \left(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial \bar{t}} \right)^n + f(x, t) g(\bar{x}, \bar{t}) \right]_{x=\bar{x}, t=\bar{t}} \quad (7.105)$$

这里 D_z 和 $\frac{\partial}{\partial z}$ 被定义为

$$D_z = \delta D_t + \varepsilon D_x, \quad \frac{\partial}{\partial z} = \delta \frac{\partial}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \quad (7.106)$$

这里 δ 和 ε 是常数。此 D 标符具有以下特点：

- (1) $D_z^m f \cdot g = (-1)^m D_z^m g \cdot f$;
- (2) $D_z^n f \cdot 1 = \left(\frac{\partial}{\partial z} \right)^n f$;
- (3) $D_z^m f \cdot g = D_z^{m-1} (f_z \cdot g - f \cdot g_z)$;
- (4) $D_z^m e^{p_1 x} e^{p_2 x} = (p_1 - p_2)^m e^{(p_1 - p_2)x}$;
- (5) $e^{\varepsilon D_z} f(x) \cdot g(x) = f(x + \varepsilon) g(x - \varepsilon) = \left[\exp \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] f(x) \left[\exp \left(-\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] g(x)$;
- (6) $e^{\varepsilon D_z} f g \cdot h q = \left[e^{\varepsilon D_z} f \cdot g \right] \left[e^{\varepsilon D_z} g \cdot h \right]$;
- (7) $\exp \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{f}{g} \right) = \frac{e^{\varepsilon D_z} f \cdot g}{\cosh(\varepsilon D_z) g \cdot g}$;
- (8) $2 \cosh \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \log f = \log [\cosh(\varepsilon D_z) f \cdot f]$;
- (9) $e^{\varepsilon D_z} f \cdot g = \exp \left[2 \cosh \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \log g \right] \left[\exp \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \left(\frac{f}{g} \right) \right]$;
- (10) $e^{\varepsilon D_z} f \cdot g = \exp \left[\sinh \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \log \left(\frac{f}{g} \right) + \cosh \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \log (fg) \right]$;
- (11) $D_x^n D_y^m \cdots D_z^k f \cdot g = (-1)^{i+j+\cdots+k} D_x^n D_y^m \cdots D_z^k g \cdot f$;
- (12) $2 \cosh \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z} \right) \ln f = \ln (f + \varepsilon) + \ln (f - \varepsilon) = \ln [\cosh(\varepsilon D_z) f]$.

式中, f, g 和 q 是 x 和 t 的函数。

7.6.2 非线性Schrödinger方程的 D 算符解

对于在 $V(x) = A(\phi) = 0$ 时, 一维非线性 Schrödinger 方程式 (3.2) 现写成

$$i\phi_t + p\phi_{x'x'} + b|\phi|^2\phi = 0 \quad (7.107)$$

这里 p 是一个常数。现设 $\phi = g/f$ ，这里 g 是复数， f 是实数，使用等式

$$\exp\left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial z}\right)\left(\frac{g}{f}\right) = \frac{g(x' + \varepsilon)f(x' - \varepsilon)}{f(x' + \varepsilon)g(x' - \varepsilon)} = \frac{\exp(\varepsilon D_{x'})g \cdot f}{\exp(\varepsilon D_{x'})f \cdot f}$$

此处 $t' = t/\hbar$ ， $x' = x\sqrt{2m/\hbar^2}$ ，于是发现 g 和 f 必须满足

$$\frac{(iD_{t'} + D_{x'}^2)g \cdot f}{f^2} - \frac{g}{f} \left(\frac{pD_{x'}^2 f \cdot f - bgg^*}{f^2} \right) = 0$$

将 $\phi = g/f$ 代入式(7.107)，可得

$$(iD_{t'} + pD_{x'}^2)g \cdot f = 0, \quad pD_{x'}^2 f \cdot f - bgg^* = 0 \quad (7.108)$$

同时 g 和 f 也满足式(7.105)。对于式(7.107)所具有的单一包络孤子解可设为

$$g = Ae^{i\theta}e^{\eta}, \quad f = 1 + ae^{\eta+\eta^*} \quad (7.109)$$

$$\text{式中,} \quad \theta = kx' - \omega t', \quad \eta = Kx' - \Omega t' - \eta^0, \quad a = \frac{bA^2}{2\left[p(k+k^*)^2\right]} \quad (7.110)$$

$$\text{其色散关系为} \quad -i(\Omega + i\omega) + p(K + ik)^2 = 0$$

于是发现式(7.108)的去耦合解并未在 g 和 f 之间导致一个简单关系。于是 Hirota 将式(7.108)的解设为

$$\begin{aligned} g &= \varepsilon g_1 + \varepsilon^3 g_3 + \cdots \\ f &= 1 + \varepsilon^2 f_2 + \cdots \end{aligned} \quad (7.111)$$

$$\begin{aligned} \text{则从式(7.108)可得到} \quad ig_{1t'} + g_{1x'x'} &= 0, \quad f_{2x'x'} = \frac{1}{2}g_1g_1^* \\ ig_{3t'} + g_{3x'x'} &= -(iD_{t'} + pD_{x'}^2)g_1 \cdot f_2, \cdots \end{aligned}$$

这些方程是可循环求解的，直到这个非均匀性出现趋于 0 时为止。在此情况下，由这些方程定义的这一项和以后的其他项都可以认为是 0。

将式(7.109)代入 $\phi = g/f$ ，可得到前面已给出 $V(x) = A(\phi) = 0$ 时式(3.2)的非线性 Schrödinger 方程的解。

此方法也可用于求解式(3.4)的 Sine-Gordon 方程的孤子解。但在 $|x| \rightarrow \infty$ 时 $\partial\phi/\partial x \rightarrow 0$ 的条件下，此方程的解可设为

$$\phi(x, t) = 4 \arctan \left[\frac{g(x, t)}{f(x, t)} \right]$$

在此情况下, 相应的 f 和 g 的级数解的形式也改变了, 具体的求解可参考有关文章。

7.6.3 三维非线性 Schrödinger 方程的解

此方法也可以推广到求解二维和三维情况时的非线性动力学方程的解。Tajiri 等人对此做了不少工作。例如, 对于三维非线性 Schrödinger 方程

$$i\phi_t + p\phi_{x'x'} + q'\phi_{y'y'} + r'\phi_{z'z'} + b|\phi|^2\phi = 0 \quad (7.112)$$

在 $b > 0$, $p, q' > 0$ 和 $r' < 0$ 时, Tajiri 等人做了以下函数代换:

$$\phi = \frac{g(x', y', z', t')}{f(x', y', z', t')} \quad (7.113)$$

式中, $f = f^*$ 。将式 (7.113) 代入式 (7.112), 可得

$$\begin{cases} (iD_{t'} + pD_{x'}^2 + q'D_{y'}^2 + r'D_{z'}^2)g \cdot f = 0 \\ (pD_{x'}^2 + q'D_{y'}^2 + r'D_{z'}^2)f \cdot f - b|g|^2 = 0 \end{cases}$$

其中双线性算符被定义为

$$\begin{aligned} & D_x^k D_y^l D_z^m D_t^n a(x', y', z', t') \cdot \bar{b}(x', y', z', t') \\ & \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{\partial}{\partial \hat{x}'} \right)^k \left(\frac{\partial}{\partial y'} - \frac{\partial}{\partial \hat{y}'} \right)^l \left(\frac{\partial}{\partial z'} - \frac{\partial}{\partial \hat{z}'} \right)^m \left(\frac{\partial}{\partial t'} - \frac{\partial}{\partial \hat{t}'} \right)^n \times \\ & a(x', y', z', t') \cdot \bar{b}(x', y', z', t') \Big|_{x'=\bar{x}, y'=\bar{y}, z'=\bar{z}, t'=\bar{t}} \end{aligned}$$

按以上方法, 方程式 (7.112) 的单一包络孤子解式 (7.113) 中的 g 和 f 分别为

$$g = Ae^{i\theta}e^\eta, \quad f = 1 + ae^{\eta+\eta^*}$$

式中, $\theta = Kx' + Ly' + Mz' - \Omega t'$, $\eta = Kx' + Ly' + Mz' - \Omega t' - \eta^0$

$$a = \frac{bA^2}{2 \left[p(K + K^*)^2 + q'(L + L^*)^2 + r'(M + M^*)^2 \right]}$$

其色散关系为 $-i(\Omega + i\omega) + p(K + ik)^2 + q'(L + il)^2 + r'(M + im)^2 = 0$

7.7 Bäcklund 变换法

对于给定的波函数 ϕ 的变化若能表示为 $d\phi = Pdx + Qdt$, 则对于相应的一阶微分

方程 $\phi_x = P$ 和 $\phi_t = Q$ 的可积性要求 $P_t = Q_x$ 。从这种变化中可求出 ϕ 满足的方程之解,

此法称为 **Bäcklund 变换 (BT) 法**。在此方法中, 首要的任务是求出 Q 和 P 与 ϕ 的函数关系, 再选择一个初始值 ϕ_0 , 使用 $\phi_{1x} = P(\phi_1, \phi_0)$ 和 $\phi_{1t} = Q(\phi_1, \phi_0)$ 求出 ϕ_1 来。由于对应一个非线性动力学方程存在多个 BT 变换, 其关键的问题是选择恰当的 BT 来求出动力学方程的解。

7.7.1 自动Bäcklund变换法

此法由 Rao 和 Rang Wale 与 Rogers 等人所发展。对于一个 2×2 的本征值问题

$$\psi_x = \hat{Y}\psi, \quad \psi_t = \hat{T}\psi \quad (7.114)$$

$$\text{式中, } \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}, \quad \hat{Y} = \begin{pmatrix} \lambda & q(x, t) \\ r(x, t) & -\lambda \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} A(x, t, \lambda) & B'(x, t, \lambda) \\ C(x, t, \lambda) & -A(x, t, \lambda) \end{pmatrix} \quad (7.115)$$

ψ_1 和 ψ_2 是本征函数, λ 是本征值。由相容性条件 $\psi_{xt} = \psi_{tx}$ 可得到

$$\hat{Y}_t - \hat{T}_x = [\hat{Y}, \hat{T}] = \hat{Y}\hat{T} - \hat{T}\hat{Y} \quad (7.116)$$

由此方程可得到在式 (7.115) 中的 A , B' 和 C 满足的方程为

$$A_x = qC - rB', \quad B'_x - 2\lambda B' = q_t - 2Aq, \quad C_x + 2\lambda C = r_t + 2Ar \quad (7.117)$$

现在让 Lax 方程中的 \hat{L} 和 \hat{B} 算符分别表示为

$$\hat{L} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & -q \\ r & -\frac{\partial}{\partial x} \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \hat{T}$$

这里线性算符 \hat{B} 和 \hat{L} 满足相容性条件, $i\hat{L}_t + [\hat{L}, \hat{B}] = 0$ 。于是此问题已纳入 AKNS 系统, 在其中的 A , B' 和 C 的特殊选择使该问题的非线性动力学方程可用反散射方法求解。对于 Sine-Gordon 方程, $r = -q = -\phi_x/2$, 而

$$A = \frac{1}{4\lambda} \cos \phi, \quad B' = C = \frac{1}{4\lambda} \sin \phi \quad (7.118)$$

对于式 (3.155) 的非线性 Schrödinger, 这里 $\gamma = -q = -\phi^*$, 则

$$A = 2i\lambda^2 + i|\phi|^2, \quad B' = i\phi_{x'} + 2i\lambda\phi, \quad C = i\phi_{x'}^* - 2i\lambda\phi^* \quad (7.119)$$

对于上述方程的自动 Bäcklund 变换是由 AKNS 公式构成的, 其关键一步是引入

函数 $\Gamma = \Psi_1/\Psi_2$ ，于是从式(7.114)～式(7.119)中可以导出一组 Riccati 方程对为

$$\Gamma_x = 2\lambda\Gamma + q - r\Gamma^2, \quad \Gamma_t = 2A\Gamma + B' - C\Gamma^2 \quad (7.120)$$

在 Sine-Gordon 方程中， $r = -q$ ，则从 ANKS 系统得到

$$\psi_{xx} - \lambda^2\psi = \phi\psi, \quad \psi_{xx}^* - \lambda^2\psi^* = \phi^*\psi^* \quad (7.121)$$

这里 $\psi = \psi_1 + i\psi_2$ 和 $\phi = -iq_x - q^2$ 。此方程组在 Crum 型变换

$$\psi' = \frac{1}{\psi}, \quad \phi' = \phi + 2(\ln \psi')_{xx}, \quad \psi'^* = \frac{1}{\psi^*}, \quad \phi'^* = \phi^* + 2(\ln \psi'^*)_{xx} \quad (7.122)$$

下是不变的，这里 $w' = w - i \ln \left(\frac{\psi}{\psi^*} \right) = w + 2 \arctan \left(\frac{\psi_2}{\psi_1} \right)$

其中， w 和 w' 分别是由 $q = w_x$ 和 $q' = w'_x$ 决定的势能，则在式(7.122)变换下有

$$\Gamma = \cot \left[\frac{1}{2}(w' - w) \right] \quad (7.123)$$

将它代入 Riccati 方程组，即式(7.120)中，可得到具有 $r = -q$ 的 ANKS 系统的子系统的一个遗传 Bäcklund 变换，它为

$$\begin{aligned} w_t - w'_t &= 2A \sin(w' - w) - (B' + C) \cos(w' - w) + B' - C \\ w_x + w'_x &= 2\lambda \sin(w - w'), \quad \tilde{x} = x, \tilde{t} = t \end{aligned} \quad (7.124)$$

如果设 $\alpha' = \lambda/2$ ， $w = -\phi/2$ ，并代式(7.118)进入式(7.124)，使得得到 Sine-Gordon

方程式 $\phi_{xx} - \phi_{tt} = \sin \phi$ 的自动 Bäcklund 变换为

$$\begin{aligned} \phi'_x &= \phi_x - 2\alpha' \sin \left(\frac{\phi + \phi'}{2} \right) = BT_1(\phi, \phi_x, \phi') \\ \phi'_t &= -\phi_t + \frac{2}{\alpha'} \sin \left(\frac{\phi - \phi'}{2} \right) = BT_2(\phi, \phi_t, \phi') \end{aligned} \quad (7.125)$$

这里 $x = x'$ ， $t = t'$ ，而 α' 是一个非零的 Bäcklund 参数。如果应用可积条件 $\frac{\partial BT'_1}{\partial t} -$

$\frac{\partial BT'_2}{\partial x} = 0$ ，则能得到 $\phi'_{xt} = \sin \phi'$ 。但是，若将式(7.125)写成下面的形式：

$$\phi_x = \phi'_x - 2\alpha' \sin\left(\frac{\phi + \phi'}{2}\right) = BT'_1(\phi', \phi'_x, \phi)$$

$$\phi_t = \phi'_t + \frac{2}{\alpha'} \sin\left(\frac{\phi - \phi'}{2}\right) = BT'_2(\phi', \phi'_t, \phi)$$

则从可积条件

$$\frac{\partial BT'_1}{\partial t} - \frac{\partial BT'_2}{\partial x} = 0$$

可求得 $\phi'_{xt} = \sin \phi'$ 。于是 Sine-Gordon 方程的不变性被证实。其实式 (7.125) 的 Bäcklund

变换相同于式 (3.27)。若在式 (7.125) 中设 $\phi' = 0$ ，可从其中求得

$$\phi_x = 2\alpha' \sin\left(\frac{\phi}{2}\right), \quad \phi_t = \frac{2}{\alpha'} \sin\left(\frac{\phi}{2}\right)$$

于是可求得上述 Sine-Gordon 方程的解为

$$\phi = 4\arctan\left\{\exp\left[\pm \frac{x - x_0 - vt}{\sqrt{1 - v^2}}\right]\right\}, \quad v = \frac{1 - \alpha'^2}{1 + \alpha'^2}$$

对于在 $r = -q^*$ 的上述非线性 Schrödinger 方程的遗传自动 Bäcklund 变换由 Konno 和 Wadati 经 I' 和 q' 求得。此时，在式 (7.120) 中的 Riccati 方程保留不变性。从式 (7.119) 可求得的自动 Bäcklund 变换为

$$\phi_x + \phi'_x = (\phi - \phi')\sqrt{4\lambda^2 - |\phi + \phi'|^2}, \quad \tilde{x} = x, \quad \tilde{t} = t \quad (7.126)$$

$$\phi_t + \phi'_t = i(\phi_x - \phi'_x)\sqrt{4\lambda^2 - |\phi + \phi'|^2} + \frac{i}{2}[\phi + \phi']\left[|\phi + \phi'|^2 + |\phi - \phi'|^2\right]$$

相应的非线性 Schrödinger 方程解的另一个叠加原理可表示成

$$\begin{aligned} &(\phi_0 - \phi_1)\sqrt{4\lambda_1^2 - |\phi_0 + \phi_1|^2} - (\phi_0 - \phi_2)\sqrt{4\lambda_2^2 - |\phi_0 + \phi_2|^2} + \\ &(\phi_2 - \phi_{12})\sqrt{4\lambda_1^2 - |\phi_2 + \phi_{12}|^2} - (\phi_1 - \phi_{12})\sqrt{4\lambda_2^2 - |\phi_0 + \phi_{12}|^2} = 0 \end{aligned} \quad (7.127)$$

式中， $\phi_i = B_{\lambda_i}\phi_0$ ($i=1,2$)； $\phi_{12} = B_{\lambda_1}B_{\lambda_2}\phi_0 = B_{\lambda_2}B_{\lambda_1}\phi_0$ ； ϕ_0 是一个初始解。使用式 (7.126) 和式 (7.127) 可求得上述非线性 Schrödinger 方程的解，这个解已在前面给出。

7.7.2 Hirota Bäcklund变换法

Hirota 利用前面建立的 D 算符来构建 Bäcklund 变换。例如，式 (7.107) 的非线性

Schrödinger 方程, 当设 $\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}x \rightarrow x', \frac{t}{\hbar} \rightarrow t'$ 后, Hirota 假设

$$\Omega = \left[(iD_{t'} + D_{x'}^2)(g \cdot f) \right] f'^2 - f^2 \left[(iD_{t'} + D_{x'}^2)(g' \cdot f') \right] \quad (7.128)$$

如果 (g, f) 和 (g', f') 满足式 (7.108) 的第一式时, 则 $\Omega \rightarrow 0$ 。借助于这一对等式, 他重写式 (7.128) 为

$$\begin{aligned} \Omega = & iD_{t'}(g \cdot f' + f \cdot g')ff' - (gf' + fg')iD_{t'}f \cdot f' + 2D_{x'}[D_{x'}(g \cdot f' + f \cdot g')] \cdot ff' + \\ & (g \cdot f' - f \cdot g')D_{x'}^2 f \cdot f' - D_{x'}^2(g \cdot f' - f \cdot g') \cdot ff' + \\ & \frac{1}{2} \left[(gf' + fg')(gg'^* - g^*g') - (gf' - fg')(gg'^* + g^*g') \right] \end{aligned} \quad (7.129)$$

这里也假设 (g, f) 和 (g', f') 满足式 (7.108) 的第二式。若考虑在方程的孤子梯的梯级的连续性关系, Hirota 得到

$$D_{x'}(g \cdot f' + f \cdot g') = \mu(gf' - fg')$$

则式 (7.129) 去耦后可得到

$$\begin{aligned} iD_{t'}(g \cdot f' + f \cdot g') - (D_{x'}^2 + \lambda)(g \cdot f' - f \cdot g') &= 0 \\ [iD_{t'} + 2\mu D_{x'} + D_{x'}^2 - (2\mu^2 - \lambda)]f \cdot f' &= gg'^* \end{aligned} \quad (7.130)$$

于是式 (7.130) 便构造起了在 (g, f) 和 (g', f') 之间的 Bäcklund 变换, 即如果知道 (g, f) 或 $\phi(x, t)$ 的初始值, 则从式 (7.130) 可求出 (g', f') 和相应的解。在这种情况下, 我们选择 $\mu = K_N - K_N^*$, $\lambda = 2(K_N^2 + K_N^{*2}) + (K_N^2 - K_N^*)^2$, 这里 K_N 是由式 (7.111) 的第一式的积分引入的一个积分常数。对于 Sine-Gordon 方程式 $\phi_{xt} = \sin \phi$, 使用 Hirota 变换为 $\phi = 2i \log(g/f)$, 可求得

$$D_x D_t f \cdot f = \frac{1}{2}(f^2 - g^2), \quad D_t D_x g \cdot g = \frac{1}{2}(g^2 - f^2)$$

此 Sine-Gordon 方程的 Bäcklund 变换为

$$D_x f' \cdot f = \frac{K}{2} g' \cdot g, \quad D_t f' \cdot g = \frac{1}{2K} g' \cdot f \quad (7.131)$$

这里 K 是一个实常数。为了得到一个叠加公式, 可把式 (7.131) 重写为

$$\begin{aligned} D_t f_1 \cdot g_0 &= -\frac{1}{2K_1} g_1 \cdot f_0, & D_t \hat{f}_1 \cdot g_0 &= \frac{1}{2K_2} \hat{g}_1 \cdot f_0 \\ D_t f_2 \cdot g_1 &= -\frac{1}{2K_2} g_2 \cdot f_1, & D_t f_2 \cdot \hat{g}_1 &= -\frac{1}{2K_1} g_2 \cdot \hat{f}_1 \end{aligned} \quad (7.132)$$

式中, \hat{f}_1 和 \hat{g}_1 是具有参数 K_2 的单孤子解, 而 K_1 和 K_2 是相应于这些解的参数。使用前面定义的 D 算符的特点:

$$D_x^2(g \cdot f)hq - gf(D_x^2 h \cdot q) = D_x \{ (D_x g \cdot q) \cdot hf + gq \cdot (D_x h \cdot f) \}$$

Hirota 得到了上述 Sine-Gordon 的孤子解的叠加公式为

$$\frac{g_0/f_0}{g_2^*/f_2} = \frac{K_2(g_1^*/f_1) - K_1(\hat{g}_1/\hat{f}_1)}{K_2(\hat{g}_1/\hat{f}_1) - K_1(g_1/f_1)} \quad (7.133)$$

将 $\phi = 2i \log(g/f)$ 代入式(7.133), 可得

$$e^{i(\phi_2 - \phi_0)/2} = \frac{K_2 - K_1 e^{i(\phi_1 - \hat{\phi}_1)/2}}{-K_1 + K_2 e^{i(\phi_1 - \hat{\phi}_1)/2}}$$

于是可得

$$\tan \left[\frac{1}{4}(\phi_2 - \phi_0) \right] = \frac{K_1 + K_2}{K_1 - K_2} \tan \left[\frac{1}{4}(\phi_1 - \hat{\phi}_1) \right] \quad (7.134)$$

若 $\alpha_1 = K_1$ 和 $\alpha_2 = K_2$ 时, 式(7.134)就与在第3章所描述的 Sine-Gordon 方程的叠加公式(3.26)相似。若应用式(7.131)、式(7.133)或式(7.134), 便从可知的解中求出另一个新解。

7.8 分离变量法

Lamb 发展了一个分离变量的方法解非线性动力学方程。例如, 对于 $\phi_{xx} - \phi_{tt} = \sin \phi$ 的 Sine-Gordon 方程, 他将解表示为

$$\tan \left[\frac{1}{4} \phi(x, t) \right] = G(x)F(t) \quad (7.135)$$

将式(7.135)代入原 Sine-Gordon 方程得到了两个一阶微分方程:

$$\begin{aligned} G_x^2(x) &= -C'G^4(x) + \ell G^2(x) + \beta' \\ F_t^2(t) &= -\beta'F^4(t) + (\ell - 1)F^2(t) + C' \end{aligned} \quad (7.136)$$

这里 C' , β' 和 ℓ 是一些积分常数。当 $C' = \beta' = 0$ 时, 式(7.136)变为

$$G_x = n\sqrt{\ell}G, \quad F_t = n\sqrt{\ell - 1}F \quad n = \pm 1$$

这组方程的解比较容易求得。则式(7.135)现在可表示成

$$\tan \left[\frac{1}{4} \phi(x, t) \right] = \text{Re} \exp \left\{ n\sqrt{\ell} \left[x - x_0 - \frac{\sqrt{\ell - 1}}{\ell} t \right] \right\} \quad (7.137)$$

相应于 $\ell > 1$, $0 < \ell < 1$ 和 $\ell < 0$ 的三种情况存在有三种不同类型的解, 即

(1) 当 $l > 1$ 时, 可假设 $\sqrt{\ell-1}/\ell = v$, $\sqrt{\ell} = \gamma = 1/\sqrt{1-v^2}$, 在 $0 < v^2 < 1$ 下, 式(7.137)可写成

$$\phi(x, t) = 4\arctan\{\exp[n\gamma(x - x_0 - vt)]\} \quad (7.138)$$

这与前面给出的结果一致。

(2) 在 $0 < l < 1$ 的情况下, 可假设 $\sqrt{l-1}/l = i\omega$, $\sqrt{l} = 1/\sqrt{1+\omega^2}$ 和 $0 \leq \omega^2 < 1$, 则其解式(7.137)为

$$\phi(x, t) = 4\arctan\left[\exp\left(\frac{nx}{1+\omega^2}\right)\cos\left(\frac{\omega t}{1+\omega^2}\right)\right]$$

(3) 在 $\ell < 0$ 时, 可设 $\sqrt{\ell-1}/\ell = \tilde{v}$, $\tilde{\gamma} = 1/\sqrt{\tilde{v}^2 - 1}$, 于是式(7.137)可得

$$\phi(x, t) = 4\arctan\{\cos[\tilde{\gamma}(x - \tilde{x}t)]\}$$

这个解描述了波长是 $\lambda = 2\pi/\tilde{\gamma} = 2\pi\sqrt{\tilde{v}^2 - 1}$ 和速度 $\tilde{v} > 1$ 的波动解。当 $C' = 0$, $B' = 0$ 时, 式(7.136)变成

$$G_x^2 = lG^2 + 1, \quad F_t = -F^2 + (l-1)F^2 \quad (7.139)$$

在 $l > 1$ 时式(7.139)有两种类型的解, 其中一个解为 $G(x) = \sinh(\gamma x)/\sqrt{l}$, $F(t) = \sqrt{l^2 - 1}\text{csch}(\gamma vt)$, 则式(7.135)现在能写成

$$\phi_{k-k}(x, t) = 4\arctan\left[\frac{v\sinh(\gamma x)}{\cosh(\gamma vt)}\right] \quad (7.140)$$

此解表示了以频率 $\omega/\sqrt{1+\omega^2}$ 运动的孤子。分别以速度 v 和 $-v$ 运动的两个相互作用的 Kink 孤子的运动。其情况与 3.8 节所描述的类似。方程式(7.139)也有另一个解

$$G(x) = i\sqrt{l}\cosh(\gamma x), \quad F(t) = -i\sqrt{l-1}\text{sech}(\gamma vt)$$

于是有

$$\phi_{K-A}(x, t) = 4\arctan\left[\frac{v\cosh(\gamma x)}{\sinh(\gamma vt)}\right] \quad (7.141)$$

此解描述了一个 Kink 孤子与另外一个反 Kink 孤子的相互碰撞。

当 $C' = 0$ 和 $B' = 1$ 及 $0 < l < 1$ 时, 式(7.146)有下列解

$$G(x) = i\cosh(\sqrt{l}x)/\sqrt{l}, \quad F(t) = i\sqrt{1-l}\text{sech}(\sqrt{1-l}t)$$

于是有

$$\phi(x, t) = 4\arctan\left[\frac{\sin(wt/\sqrt{1+w^2})}{w\cosh[x/\sqrt{1+w^2}]}\right], \quad w = \sqrt{\frac{1-l}{l}} \quad (7.142)$$

该解描述了一个 Kink 孤子的束缚态, 因此它是一个呼吸子, 并满足在 $|x| \rightarrow \infty$ 时

$\phi(x, t) \rightarrow 0$ 的关系。其内部振荡频率为 $\omega = w/\sqrt{1+w^2}$ ，其延伸的距离反比于 $1/\sqrt{1+w^2}$ 。相应的行波呼吸子能通过 Lorentz 变换： $t \rightarrow \gamma(t - x/v)$, $x \rightarrow \gamma(x - vt)$ 得到，这里 $\gamma = 1/\sqrt{1-v^2}$ ，于是方程的行波解可写成

$$\phi(x, t) = 4\arctan \left\{ \frac{\tan \mu' \sin[(t - x/v)\gamma \cos \mu']}{\cosh[\gamma(x - vt)] \sin \mu'} \right\} \quad (7.143)$$

式中， $\mu' = \arctan(1/w)$ ，这个运动呼吸子的跳动频率为 $\omega' = \gamma \cos \mu' = \gamma w'/\sqrt{1+w^2}$ 。将

$$E = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx [\phi_x^2 + \phi_t^2 + 2(1 - \cos \phi)] \quad \text{和} \quad P = - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_t \phi_x$$

代入式(7.143)，可得到这个呼吸子的能量与动量为

$$E_{\text{br}} = \frac{16 \sin \mu'}{\sqrt{1-v^2}} \quad \text{和} \quad P_{\text{br}} = \frac{16v \sin \mu'}{\sqrt{1-v^2}} \quad (7.144)$$

由此可得

$$E_{\text{br}}^2 = P_{\text{br}}^2 + M_{\text{br}}^2$$

这里 $M_{\text{br}} = 16 \sin \mu'$ 是无运动的呼吸子的质量。由此，自由 Kink 孤子或反 Kink 孤子的整个能量为 16γ ，而这呼吸子的束缚能为 $E_B = 16\gamma(1 - \sin \mu')$ 。

在 $C' \neq 0$ 和 $\beta' \neq 0$ 的情况下，Lamb 和 Davydov 假设

$$G(x) = \tilde{G}(x) \sqrt{\frac{\beta'}{C'}}, \quad F(t) = \tilde{F}(t) \left(\frac{C'}{\beta'} \right)^{1/4}$$

$$\alpha' = \sqrt{C'\beta'}, \quad G(x)F(t) = \tilde{G}(x)\tilde{F}(t)$$

于是式(7.136)变成

$$\tilde{G}_x^2 = -\alpha' \tilde{G}^4 + l \tilde{G}^2 + \alpha'$$

$$\tilde{F}_x^2 = -\alpha' \tilde{F}^4 + (\ell - 1) \tilde{F}^2 + \alpha'$$

当 $\alpha' > 0$ 时，可表示成

$$\tilde{G}_x^2 = \alpha' (\tilde{G}_0^2 - \tilde{G}^2) (\tilde{G}^2 - \tilde{G}_1^2)$$

$$G_0^2 = -\frac{1}{2\alpha'} [l + \sqrt{l^2 + 4\alpha'}], \quad G_1^2 = \frac{1}{2\alpha'} [\sqrt{l^2 + 4\alpha'} - l]$$

其中， $\tilde{\phi}(x) = \tilde{G}_0 \text{cn}(u, K)$, $u = \alpha' K^{-1} G_0 (x - x_0)$, $K^2 = \frac{\ell + \sqrt{\ell^2 + 4\alpha'}}{2\sqrt{\ell^2 + 4\alpha'}}$

$$\tilde{F}(t) = \tilde{F}_{0\text{cn}} \left[\frac{\sqrt{\alpha'} \tilde{F}_0 t}{J}, J \right], \quad \tilde{F}_0 = \frac{1}{2\alpha'} \left\{ \ell - 1 + \sqrt{(\ell - 1)^2 + 4\alpha'} \right\}$$

$$J^2 = \frac{l - 1 + \sqrt{(l - 1)^2 + 4\alpha'}}{2\sqrt{(l - 1)^2 + 4\alpha'}}$$

于是此 Sine-Gordon 方程的解为

$$\tan \left[\frac{\phi(x,t)}{4} \right] = \tilde{G}_0 \tilde{F}_0 \operatorname{cn} \left[\frac{g_0 \sqrt{\alpha}}{K} (x - x_0), K \right] \operatorname{cn} \left[\frac{\sqrt{\alpha} \tilde{F}_0}{J} t, J \right] \quad (7.145)$$

这个解表示了周期性驻波的等离子振动。

若在式(7.136)中的 β' 用 $-\beta$ 代替, 在 $C' \neq 0$, $\beta' < 0$, $\beta'' = \sqrt{-\beta' C'} > 0$ 时, 根据以上方法, Lamb 和 Davydov 得到了此时 Sine-Gordon 方程的解为

$$\tan \left[\frac{\phi(x,t)}{4} \right] = \tilde{G}_0 \tilde{F}_0 \operatorname{dn}(u, K) \operatorname{sn}(V, J')$$

$$\text{式中, } u = \tilde{G}_0 \sqrt{\beta''} (x - x_0), \quad V = \frac{\sqrt{\beta''}}{(-\beta)} \tilde{F}_0 t, \quad (-J')^2 = \frac{1-l+\sqrt{(l-1)^2-4\beta''}}{1-l+\sqrt{(l-1)^2-4\beta''}}$$

$$\tilde{G}_0^2 = \frac{l+\sqrt{l^2-4\beta'}}{2\beta''}, \quad \tilde{F}_0^2 = \frac{1-l+\sqrt{(l-1)^2-4\beta''}}{4\beta''}$$

此解描写了呼吸子的振荡特性。

7.9 在多粒子系统中微观粒子特性的解法

7.9.1 多粒子系统中的非线性激发及其特点

在许多量子液体、固体、分子和磁体及原子核中存在多粒子的复杂的相互作用, 其中的微观粒子的运动状态不可能用前面的非线性 Schrödinger 方程进行正确描述。Barashenkov 和 Makhankov 推出了此系统的微观粒子满足以下的非线性 Schrödinger 方程:

$$i\phi_{t'} + \Delta\phi - \alpha_1\phi + b|\phi|^2\phi - \alpha_2|\phi|^4\phi = 0 \quad (7.146)$$

式中, $t' = t/\hbar$; $x'_i = x_i\sqrt{2m/\hbar^2}$ ($i=1,2,3$); 而 $\alpha_2|\phi|^4\phi > 0$ 是由多粒子效应引起的非线性相互作用。此方程的求解较困难。对此 Barashenkov 等人在常数 $\alpha_2 = b = 1$ 和一维情况下, 引入了变换:

$$\phi = \frac{\varphi}{\sqrt{2(2\rho_0 + A)/3}}, \quad t' \rightarrow t' \left[\frac{4}{3}(A + 2\rho_0)^2 \right], \quad x' \rightarrow \frac{2}{\sqrt{3}} x'(A + 2\rho_0)$$

则式(7.146)变成

$$i\varphi_{t'} + \varphi_{x'x'} - \rho_0(\rho_0 + 2A)\varphi + 2(2\rho_0 + A)|\varphi|^2\varphi - \alpha_2|\varphi|^4\varphi = 0 \quad (7.147)$$

式中, $\rho_0 = \frac{1}{2}(1 + \sqrt{1 + 4\alpha_1}) > 0$, $\frac{A_{1,2}}{\rho_0} = -2 + \frac{3}{4\alpha_1} \pm \frac{3\sqrt{1 + 4\alpha_1}}{4|\alpha_1|}$, $2\rho_0 + A > 0$

这里引入了两个参数 A 和 ρ_0 使方程的耦合效应消除。虽然 ρ_0 是任意常数, 但 A/ρ_0 只能取一定值。于是, 式(7.146)称为“点滴”(drop)形式, 式(7.147)称为凝聚(condensate)形式。如果 $\alpha_1 \geq -1/4$ 时, 这个“点滴”退化为“凝聚”形式。在式(7.146)中, 如果做 $\phi(x', t') = e^{i\alpha_1 t'} \bar{\phi}(x', t')$ 变换, 可消去 $\alpha_1 \phi$ 项。对于“点滴”的边界条件可表成

$$\phi(x', t') \rightarrow 0, \text{ 在 } |x'| \rightarrow \infty \quad (7.148)$$

则系统的能量和粒子数可表示为

$$E = \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ |\phi_{x'}|^2 - \frac{1}{2} |\phi|^4 + \frac{1}{3} |\phi|^6 \right\} dx', \quad N = \int_{-\infty}^{+\infty} |\phi|^2 dx' \quad (7.149)$$

在 $\phi_r = 0$ 情况下, 利用式(7.148), 经过两次积分可得到

$$\phi_{dr} = e^{i\theta_0} \left\{ \frac{-4\alpha_1}{1 + \sqrt{1 + 16\alpha_1/3} \cosh[2\sqrt{-\alpha_1}(x' - x'_0)]} \right\}^{1/2} \quad (7.150)$$

经过 Gallilei 变换

$$\begin{aligned} \theta_0 &\rightarrow \frac{v}{2}x' - \frac{v^2}{4}t' + \theta_0 \\ \cosh[2\sqrt{-\alpha_1}(x' - x'_0)] &\rightarrow \cosh[2\sqrt{-\alpha_1}(x' - vt' - x'_0)] \end{aligned} \quad (7.151)$$

则可以得到方程的运动孤子解。从式(7.150)可知其准孤子解与三个参数 x'_0 , θ_0 和 v 有

关。在 $-3/16 < \alpha_1 < 0$ 的条件下, 孤子的粒子数和能量可表示成

$$N(\alpha_1) = \sqrt{3} \operatorname{arch} \left[\frac{1}{\sqrt{1 + 16\alpha_1/3}} \right] \rightarrow 4\sqrt{-\alpha_1} \Big|_{\alpha_1 \rightarrow 0}, \quad E(\alpha_1) = \left(v^2 - \frac{3}{4} - \alpha_1 \right) N(\alpha_1) + \frac{3}{4} \sqrt{-\alpha_1}$$

当 $\alpha_1 \rightarrow -3/16$ 时, N 随着孤子的宽度增加而增加, 孤子的振幅接近于 $\phi_0 = \sqrt{3}/2$ 。式(7.150)的解意味着在孤立波的状态改变时, 由于粒子之间的吸引力, 其粒子数的密度达到峰值, 从而出现了凝聚。但此时三体排斥效应也在一个小距离内开始起作用。在一定的条件下, 粒子之间的束缚能便可保持为一个常数。这些由大量粒子形成的束缚态被凝聚为“点滴”, 如图 7.1 所示。

如果 $\alpha_1 = -3/16$ 时, 解式(7.150)给出的凝聚 $\phi_c = e^{i\theta_0} \sqrt{3}/2$, 则 $N = \infty$ 。这相当于从“点滴”状态到凝聚态的转变。因此, 这种状态和随后出现的饱和效应则是这个系统

的一个显著特点。

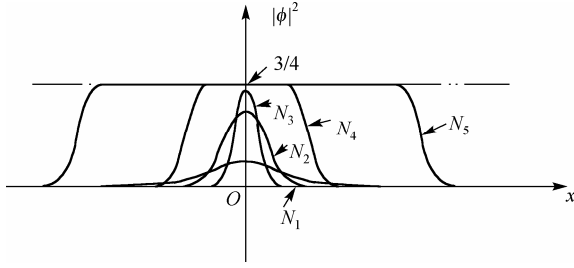


图 7.1 在 $\phi^4 - \phi^6$ 模型中非线性方程的束缚态。这里 α_1 处在 $(-3/16, 0)$ 之间, 而粒子数 $N_i = N(\alpha_i)$, 在这里 $N_5 > N_4 > N_3 > N_2 > N_1$

Barashenkov 等人研究了在非平庸边界条件 $|\phi|^2 \rightarrow \rho_0$ 下式 (7.147) 的解。此时式 (7.149) 的运动积分是发散的, 但仍可重写为

$$\begin{aligned} E &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[|\phi_{x'}|^2 + (|\phi|^2 - \rho_0)^2 (|\phi|^2 - A) \right] dx' \\ N &= \int_{-\infty}^{+\infty} (|\phi|^2 - \rho_0) dx' \end{aligned} \quad (7.152)$$

这里 A 是一个实常数。

7.9.2 动力学方程的解及其特性

考虑到这种凝聚后所产生的小色散变化, 则可把解表成

$$\varphi(x', t') = \sqrt{\rho_0} + \chi(x', t'), \quad \chi(x', t') = \eta_1 e^{i(\kappa x' - \omega t')} + \eta_2 e^{-i(\kappa x' - \omega t')}$$

这里 η_1 和 η_2 满足以下方程式:

$$\begin{aligned} \omega \eta_1 - \kappa^2 \eta_1 - 2\rho_0(\rho_0 - A)\eta_1 - 2\varphi_0^2(\rho_0 - A)\bar{\eta}_2 &= 0 \\ -\omega \eta_2 - \kappa^2 \eta_2 - 2\rho_0(\rho_0 - A)\eta_2 - 2\varphi_0^2(\rho_0 - A)\bar{\eta}_1 &= 0 \end{aligned}$$

设这个系统此时的系数行列式趋于 0, 则可得到

$$\omega^2 = \kappa^2 [\kappa^2 + 4\rho_0(\rho_0 - A)]$$

这就是在忽略了这种凝聚状态中由声速的变化引起的相互作用的改变后的 Bogolubov 色散关系, 此时的声速为

$$v_{s0} = \lim_{\kappa \rightarrow 0} \frac{\omega}{\kappa} = 2\sqrt{\rho_0(\rho_0 - A)}$$

对于小振幅的孤立波解可表示成

$$\varphi(x', t') = \sqrt{\rho(x', t')} e^{i\theta(x', t')} \quad (7.153)$$

引入 $y = \theta_{x'}$ ，从式(7.147)可得到以下动力学方程：

$$\rho_{t'} = -2(y p)_{x'}, \quad y_{t'} = \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_{x'x'}}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{\rho_{x'}^2}{\rho^2} \right)_{x'} - 2y y_{x'} + [(\rho_0 - \rho)(3\rho - \rho_0 - 2A)]_{x'} \quad (7.154)$$

引入新的坐标， $\tau = \sqrt{\varepsilon} t'$ ， $\xi = \sqrt{\varepsilon} (x' - v_s t')$ ，并应用“约化微扰理论”，对于在 $\rho = \rho_0$ 和 $y = 0$ 时的凝聚状态，可将 y 和 ρ 展开为 ε 的级数：

$$\rho = \rho_0 + \varepsilon \rho_1 + \varepsilon^2 \rho_2 + \cdots, \quad y = \varepsilon y_1 + \varepsilon^2 y_2 + \cdots$$

将这些级数代入式(7.154)，并让其中的 ε 和 ε^2 的系数趋于零，便可得到

$$\begin{aligned} v_{s0} \rho_1' &= 2\rho_0 y_1' = \partial_{\xi}, \quad v_{s0} y_1' = 2(\rho_0 - A) \rho_1', \quad v_{s0} \rho_2' = \dot{\rho}_1 + 2(y_1 \rho_1)' + 2\rho_0 y_2' = \partial_{\tau} \\ v_{s0} y_2' &= \dot{y}_1 + 2y_1 y_1' - \frac{\rho_1'''}{2\rho_0} + 2(\rho_0 - A) \rho_2' + 3(\rho_1^2)' \end{aligned} \quad (7.155)$$

这里的“'”和“·”分别表示相对于 ξ 和 t 的导数。从式(7.155)的第二式或第三式可

得到 $y_1' = v_{s0} \rho_1' / 2\rho_0$ ，而第二式和第四式退化为一个 KdV 方程

$$2\sqrt{\rho_0(\rho_0 - A)} \dot{\rho}_1 - \frac{1}{2} \rho_1''' + 3(2\rho_0 - A)(\rho_1^2)' = 0$$

通过标度变换： $\xi = \bar{\xi} \sqrt{2(2\rho_0 - A)}$ ， $\tau = \bar{\tau} \frac{v_{s0}}{2\sqrt{(2\rho_0 - A)^3}}$ ，可得到

$$\partial_{\bar{\tau}} \rho_1 - \partial_{\bar{\xi}}^3 \rho_1 + 3(\rho_1^2)_{\bar{\xi}} = 0 \quad (7.156)$$

可以求出式(7.156)有的孤子解为

$$\rho_1(\bar{\xi}, \bar{\tau}) = \frac{\tilde{b}}{2} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\sqrt{\tilde{b}}}{2} (\bar{\xi} + \bar{b} \bar{\tau} - \bar{\xi}_0) \right] \quad (7.157)$$

$$\text{或} \quad \rho(x', t') = \left\{ \rho_0 - \frac{b'}{2\rho_0 - A} \operatorname{sech}^2 \left[\sqrt{b'} \left(x' - v_{s0} t' + \frac{2b'}{v_{s0}} t' - x_0' \right) \right] \right\}^{1/2} \quad (7.158)$$

这里 $b' = \tilde{b}/2(2\rho_0 - A) \geq 0$ 。式(7.157)和式(7.158)描述了在这凝聚态中的粒子以接近于，但稍小于声速的速度运动，它是一个局域的稀疏孤立波。这表明该准孤立波的状态和背景在初始扰动下出现了衰减。但在非孤子部分中出现的压缩扰动产生的

衰减导致了一个 **Bogolubov** 波包 (具有小波数的一些声波) 的色散。而式 (7.158) 的稀疏孤立波伴随有线性的 **Bogolubov** 波的发射, 后者以相同于孤立波的传递方向运动, 但速度要快些, 其群速为 $v_g = 2(k^2 + v_{s0}^2/2)/\sqrt{k^2 + v_{s0}^2}$ 。

Barashenkov 等人得出了式 (7.147) 的局域解, 在这当中, 他们假设 $\varphi(x', t') = \varphi(\xi')$, 这里 $\xi' = x' - vt'$, 于是式 (7.147) 变成

$$\begin{aligned} \rho\rho'' - \frac{1}{2}\rho'^2 + v\theta'\rho^2 - (\theta')^2\rho^2 - \rho^2(\rho - \rho_0)(3\rho - \rho_0 - 2A) &= 0 \\ \rho\theta' + \frac{v'}{2}(\rho_0^2 - \rho) &= 0 \end{aligned} \quad (7.159)$$

将上式中的第二个方程代入第一式, 并积分后, 可得

$$2(\xi' - \xi'_0) = \int \left(\rho^2 - A\rho - \frac{v^2}{4} \right)^{-1/2} d(\rho - \rho_0)^{-1} = - \int \frac{1}{q^2} (q^2 + (2\rho_0 - A)q + c)^{-1/2} dq \quad (7.160)$$

这里 $q = \rho - \rho_0$, $c = \rho_0^2 - A\rho_0 - \frac{v^2}{4} \equiv \frac{1}{4}(v_{s0}^2 - v^2)$ 。在 $c > 0$ 或 $v^2 < v_{s0}^2$ 时式 (7.160) 有一个孤立波解, 这表明微观粒子在此情况下是局域的, 求解式 (7.160) 可得到

$$q_{\pm}(\xi') = \frac{\pm 2c}{\sqrt{A^2 + v^2} \cosh \left[2\sqrt{c}(\xi' - \xi'_0) \right] \pm (2\rho_0 - A)} \quad (7.161)$$

当 $2\rho_0 > A$ 时, 上述第二个解 $q_{-}(\xi')$ 是奇异的, 但第一个解在 $A > \rho_0$, $\rho_0 > A > 0$, $-\rho_0/2 < A < 0$ 和 $A < -\rho_0/2$ 等的四个区域中是正常的。在 $\rho_0 > A > 0$ 时, 其粒子是静止的, 其解为

$$\varphi_b = e^{i\theta_v} \frac{\sqrt{A} \cosh \left[v_{s0}(x' - x'_0)/2 \right]}{(1 + A/\rho_0) \sinh^2 \left[\sqrt{v_{s0}}(x' - x'_0)/2 \right]} \quad (7.162)$$

因此, φ_b 是 $(x' - x'_0)$ 的偶函数, 它们描述了在凝聚态中一个泡状物质的特性, 泡的深度依赖于 A 。当 A 越小时, 泡的稀度就越大。

当 $-\rho_0/2 < A < 0$ 和 $A < -\rho_0/2$ 时, 则有

$$\varphi_k = e^{i\theta_v} \frac{\sqrt{|A|} \sinh \left[v_{s0}(x' - x'_0)/2 \right]}{(1 + |A|/\rho_0) \cosh^2 \left[\sqrt{v_{s0}}(x' - x'_0)/2 \right]} \quad (7.163)$$

这里 φ_k 是 $(x' - x'_0)$ 的奇函数, 其形状是一个扭结。

从式 (7.153) 和式 (7.159) 可得两个孤子波的相位为

$$\theta_{k,b} = \frac{\sqrt{2}e^{i\theta_v} \cosh(v - iu)}{\sqrt{(2\rho_0 - A)/\sqrt{A^2 + v^2} + \cosh(2v)}} \quad (7.164)$$

这里 $v = (1/2)\sqrt{v_{s0}^2 - v^2} (x' - vt' - x'_0)$, $\cos(2u) = (A\rho_0 + v^2/2)/(\rho_0\sqrt{A^2 + v^2})$ 。 A 的符号决定了解是泡还是扭结。对于 $A=0$ 或 $\alpha_1 = -3/16$ 和在边界条件 $x' \rightarrow -\infty$ 时, 应有 $\varphi(x', t') \rightarrow 0$ 和在 $x' \rightarrow +\infty$ 时, 应有 $\varphi(x', t') \rightarrow \sqrt{\rho_0}e^{i\theta_v}$ 的条件下, 其解为

$$\varphi_k(x') = \frac{e^{i\theta_v} \sqrt{\rho_0}}{\sqrt{1 + 2\rho_0 \exp[\pm 2\rho_0(x' - x'_0)]}} \quad (7.165)$$

此解相关于两个稳定的真空态, 即凝聚 $|\varphi|^2 = \rho_0$ 和平凡解 $|\varphi|^2 = 0$ 。当 Q_v 为常数时, 式(7.165)描述了一个静止波。如果 $\theta_v = (v/2)x' - \omega t'$, 则式(7.165)描述了一个波动, 但它同一个凝聚状态一起运动。

而式(7.163)的解所对应的粒子数和能量为

$$N_{k,b} = -\text{arch} \left[\frac{2\rho_0 - A}{\sqrt{A^2 + v^2}} \right], \quad E_{k,b} = \sqrt{c} \left(\frac{A}{2} + \rho_0 \right) + \left[A\rho_0 + \frac{1}{4}(v^2 - A^2) \right] N_{k,b}$$

对于小振幅 c 和粒子速度 v 接近于声速 v_0 的情况, 式(7.163)的模为

$$\rho_{k,b}(x', t') = \left[\rho_0 - \frac{2c}{\sqrt{c^2 + v^2} \cosh[2\sqrt{c}(\xi' - \xi'_0)] + 2\rho_0 - A} \right]^{1/2} \quad (7.166)$$

在 $c \ll |2\rho_0 - A|$ 时, 有 $(2\rho_0 - A)^2 - (A^2 + v^2) = 4c$ 或 $\sqrt{A^2 + v^2} \cong 2\rho_0 - A - \frac{2c}{2\rho_0 - A}$, 于

是式(7.165)的解与式(7.161)的近似解一致。如果在式(7.166)中的 $\sqrt{c^2 + v^2}$ 用 $2\rho_0 - A$ 代替, 则可得到

$$\rho_{k,b} = \left\{ \rho_0 - \frac{2c/(2\rho_0 - A)}{1 + \cosh[2\sqrt{c}(\xi' - \xi'_0)]} \right\}^{1/2} \cong \left\{ \rho_0 - \frac{c/(2\rho_0 - A)}{\cosh^2[2\sqrt{c}(\xi' - \xi'_0)]} \right\}^{1/2}$$

这里 $v = v_k - c/v_{s0}$, $\bar{b} = 2c/(2\rho_0 - A)$ 。

除了以上解之外, $\phi^4 - \phi^6$ 模型还有另一些局域解。但在 $A > \rho_0$ 时则无局域解。用谱分析和变分法可证明上述解是稳定的。在其中的有两类局域的凝聚激发, 即在 $-1/4 < \alpha_1 < -3/16$ 时的泡激发式(7.162)和 $\alpha_1 > 3/16$ 时的扭结解式(7.163)存在。Cowan 等人用数值模拟的方法也得到过这些解。

7.10 用降低维度的方法求高维非线性方程的解

在前几节中, 主要介绍了求解一维动力学方程的解。在以下几节介绍二维和三维动力学方程的解。本节主要介绍如何以降低维度的方法求其方程的解。对此 Hirota, Tajiri, Redekopp 及 Nakamura 等人做了大量工作, 在这里介绍 Tajiri 的降维法。

7.10.1 二维非线性 Schrödinger 方程的降维求解方法

所研究的方程为

$$i\phi_t + p\phi_{x'x'} + q'\phi_{y'y'} + b|\phi|^2\phi = 0 \quad (7.167)$$

此处 p, q', b 是一些常数。在 7.6 节中介绍 Tajiri 等人用 D 算符对此方程降维求解。在这里 Tajiri 在 (x', y', t', ϕ) 空间中利用无穷小参数 ε 和 Lie 群做相似的变换

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x' + \varepsilon X(x', y', t', \phi) + O(\varepsilon^2), & \tilde{y} &= y' + \varepsilon Y(x', y', t', \phi) + O(\varepsilon^2) \\ \tilde{t} &= t' + \varepsilon T(x', y', t', \phi) + O(\varepsilon^2), & \tilde{\phi} &= \phi' + \varepsilon U(x', y', t', \phi) + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (7.168)$$

来降维求解, 此时有

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_t &= \phi_t + \varepsilon[U_t] + O(\varepsilon^2), & \bar{\phi}_{\tilde{x}\tilde{x}} &= \phi_{x'x'} + \varepsilon[U_{x'x'}] + O(\varepsilon^2) \\ \bar{\phi}_{\tilde{y}\tilde{y}} &= \phi_{y'y'} + \varepsilon[U_{y'y'}] + O(\varepsilon^2), & \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial \tilde{t}} &= \phi_t + \varepsilon[U_t] \end{aligned} \quad (7.169)$$

式中, $[U_t] = \frac{\partial U}{\partial t'} + \left(\frac{\partial U}{\partial \phi} - \frac{\partial T}{\partial t'} \right) \phi_t - \frac{\partial Y}{\partial t'} \phi_{y'} - \frac{\partial X}{\partial t'} \phi_{x'} - \frac{\partial T}{\partial \phi} \phi_t^2 - \frac{\partial Y}{\partial \phi} \phi_t \phi_{y'} - \frac{\partial X}{\partial \phi} \phi_t \phi_{x'}$

类似有

$$\begin{aligned} [U_{x'x'}] &= \frac{\partial^2 U}{\partial x'^2} + \left(2 \frac{\partial^2 U}{\partial x' \partial \phi} - \frac{\partial^2 X}{\partial x'^2} \right) \phi_{x'} - \frac{\partial^2 Y}{\partial x'^2} \phi_{y'} - \frac{\partial^2 T}{\partial x'^2} \phi_t + \\ &\quad \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2} - 2 \frac{\partial^2 X}{\partial x' \partial \phi} \right) \phi_{x'}^2 - \frac{\partial^2 Y}{\partial x' \partial \phi} \phi_{x'} \phi_{y'} - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial x' \partial \phi} \phi_{x'} \phi_t - \\ &\quad \frac{\partial^2 X}{\partial \phi^2} \phi_{x'}^3 - \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \phi_{x'}^2 \phi_{y'} - \frac{\partial^2 T}{\partial \phi^2} \phi_{x'}^2 \phi_t + \left(\frac{\partial U}{\partial \phi} - 2 \frac{\partial X}{\partial x'} \right) \phi_{x'x'} - \\ &\quad 2 \frac{\partial Y}{\partial x'} \phi_{x'y'} - 2 \frac{\partial T}{\partial x'} \phi_{x't'} - 3 \frac{\partial X}{\partial \phi} \phi_{x'} \phi_{x'x'} - \frac{\partial Y}{\partial \phi} \phi_{y'} \phi_{x'x'} - \\ &\quad \frac{\partial T}{\partial \phi} \phi_t \phi_{x'x'} - 2 \frac{\partial Y}{\partial \phi} \phi_{x'} \phi_{x'y'} - 2 \frac{\partial T}{\partial \phi} \phi_{x'} \phi_{x't'} \end{aligned}$$

这里,

$$t' = \frac{t}{\hbar}, \quad x' = x \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}, \quad y' = y \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}$$

现假设 $2D$ 非线性方程式 (7.167) 在式 (7.168) 和式 (7.169) 的变换下是不变的。则对应于 ε 的一阶项的相应方程为

$$i[U_t] + p[U_{x'x'}] + q'[U_{y'y'}] + b(2|\phi|^2 U + \phi^2 U^*) = 0 \quad (7.170)$$

式 (7.170) 的解给出了无穷小元素 (X, Y, T, U) 的值。对于式 (7.170), Tajiri 得到

$$\begin{aligned} X &= \alpha x' + kt'x' + \frac{\beta}{q'} y' + p\gamma t' + \theta_1, & Y &= \alpha y' + kt'y' - \frac{\beta}{q'} x' + p\delta t' + \theta_2 \\ T &= 2\alpha t' + kt'^2 + \theta_3, & U &= \left\{ i\omega - \alpha - k \left(t' - \frac{i}{4p} x'^2 - \frac{i}{4q'} y'^2 \right) + \frac{i}{2} \gamma x' + \frac{i}{2} \delta y' \right\} \phi \end{aligned} \quad (7.171)$$

这里 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, k, \theta_1, \theta_2, \theta_3$ 和 ω 是任意常数, 于是相似性变量和解可从求解以下特征方程得出

$$\frac{dx'}{X} = \frac{dy'}{Y} = \frac{dt'}{T} = \frac{d\phi}{U} \quad (7.172)$$

一般来讲, 这些相似变量和方程的解可通过对在式 (7.171) 中的常数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta,$

$k, \theta_1, \theta_2, \theta_3$ 和 ω 的值进行一定的选择来对式 (7.172) 进行积分得到。

7.10.2 具体情况的讨论

(a) 当 $\alpha, \beta, \gamma, \delta, k, \theta_1, \theta_2, \theta_3$ 和 $\omega \neq 0$ 和 $\beta = 0$ 时, 从对 $dx'/X = dt'/T, dy'/Y =$

dt'/T 和 $d\phi/U = dt'/T$ 的积分, Tajiri 得到新的独立和未独立变量的值为

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{x'}{\sqrt{|Q(t)|}} - \frac{(\theta_1 k - p\gamma\alpha)t + (\theta_1\alpha - p\gamma\theta_3)}{(k\theta_3 - \alpha^2)\sqrt{|Q|}} \\ \eta &= \frac{y'}{\sqrt{|Q(t)|}} - \frac{(\theta_2 k - q'\delta\alpha)t + (\theta_2\alpha - q'\delta\theta_3)}{(k\theta_3 - \alpha^2)\sqrt{|Q|}} \end{aligned} \quad (7.173)$$

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{|Q(t)|}} e^{iF'(x', y', t')} w(\xi, \eta), \quad Q(t') = kt'^2 + 2\alpha t' + \theta_3 \quad (7.174)$$

式中, $F'(x', y', t') = \omega \int \frac{dt'}{Q(t')} + \sigma_1 \left\{ \frac{1}{2} (\gamma\xi + \delta\eta) \int \frac{dt'}{\sqrt{|Q|}} + \right.$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \int \frac{1}{\sqrt{|Q|}} \left[\int \frac{\gamma(p\gamma t' + \theta_1) + \delta(q'\delta t' + \theta_2)}{Q\sqrt{|Q|}} dt' \right] dt' + \\
& \frac{k}{4p} \int \left(\int \frac{(p\gamma t' + \theta_1)}{Q\sqrt{|Q|}} dt' \right)^2 dt' + \frac{k}{4q'} \int \left(\int \frac{(q'\delta t' + \theta_2)}{Q\sqrt{|Q|}} dt' \right)^2 dt' + \\
& \frac{k\xi}{2p} \int \left(\int \frac{(p\gamma t' + \theta_1)}{Q\sqrt{|Q|}} dt' \right) dt' + \frac{k\eta}{2q} \int \left(\int \frac{(q'\delta t' + \theta_2)}{Q\sqrt{|Q|}} dt' \right) dt' + \\
& \left. \frac{kt' + \alpha}{4} \left(\frac{\xi^2}{p} + \frac{\eta^2}{q'} \right) \right\}
\end{aligned}$$

在上述计算中, Q 中的步进函数是 σ_1 , 它有 $\sigma_1 = \begin{cases} 1, & Q > 0 \\ -1, & Q < 0 \end{cases}$ 的值。将式(7.174)

代入式(7.167), 可得

$$pw_{\xi\xi} + q'w_{\eta\eta} + b|w|^2 w - \left\{ A \left(\frac{\xi^2}{p} + \frac{\eta^2}{q'} \right) + B \right\} w = 0 \quad (7.175)$$

式中,

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4} (k\theta_3 - \alpha^2) \\
B &= \sigma_1 \left\{ \left[\omega - \frac{1}{4(k\theta_3 - \alpha^2)} \right] \left[\frac{k\theta_1^2}{p} + \frac{k\theta_2^2}{q} + (p\gamma^2 + q'\delta^2)\theta_3 - 2\alpha(\gamma\theta_1 + \delta\theta_2) \right] \right\}
\end{aligned}$$

式(7.175)是一个一维的非线性 Schrödinger 方程。于是通过式(7.168)和式(7.174)的变换使得二维方程降为一维方程。

(b) 当 $\theta_1 \neq 0$ 和 $\theta_2 \neq 0$ 时, 相似性变量的函数变换为 $\xi = x' - \theta y'$, $\tau = t'$, $\phi = w(\xi, \tau)$, 这里 $\theta = \theta_1/\theta_2$, 则能够得到相应的一维非线性 Schrödinger 方程为

$$i w_\tau + (p + q'\theta^2) w_{\xi\xi} + b|w|^2 w = 0 \quad (7.176)$$

(c) 在 $\delta \neq 0$ 或 $\gamma \neq 0$ 的情况下, 相似的变量和函数变换为 $\xi = x'$ 或 y' , $\tau = t'$, $\phi = \exp[iy'^2/(4q't')]$ $w(\xi, \tau)$ 或 $\exp[ix'^2/(4p't')]$ $w(\xi, \tau)$, 于是其时的一维方程为

$$i w_\tau + \frac{i}{2\tau} w + p w_{\xi\xi} + b|w|^2 w = 0$$

或

$$i w_\tau + \frac{i}{2\tau} w + q' w_{\xi\xi} + b|w|^2 w = 0$$

在上述(a)的情况下, 如果选择 $k=1$, $\omega \neq 0$, $\alpha = \beta = \gamma = \delta = \theta_1 = \theta_2 = \theta_3 = 0$,

$\xi = x'/t'$, $\eta = y'/t'$ 和

$$\phi = \frac{1}{t'} \exp \left[i \left(\frac{x'^2}{4pt'} + \frac{y'^2}{4q't'} - \frac{\omega}{t'} \right) \right] w(\xi, t') \quad (7.177)$$

时, 可把原方程变成一维 Klein-Gordon 或 ϕ^4 场方程式

$$pw_{\xi\xi} + q'w_{\eta\eta} - ww + b|w|^2 w = 0$$

但如果选择 $\omega = 1$, $\theta_1 \neq 0$, $\theta_2 \neq 0$, $\theta_3 \neq 0$, $\alpha = \beta = \gamma = \delta = k = 0$, $\xi = x' - (\theta_1/\theta_2)t'$, $\eta = y' - (\theta_2/\theta_3)t'$ 和

$$\phi = \exp \left\{ i \left[\frac{\theta_1}{2p\theta_3} x + \frac{\theta_2}{2q'\theta_3} y - \left(\frac{\theta_1^2}{2p\theta_3^2} + \frac{\theta_2^2}{2q'\theta_3^2} - \frac{1}{\theta_3} \right) t' \right] \right\} w(\xi, \eta)$$

则可得到另一类 ϕ^4 场方程式

$$pw_{\xi\xi} + q'w_{\eta\eta} - mw + b|w|^2 w = 0$$

这里,

$$m = \frac{1}{\theta_3} - \frac{\theta_1^2}{4p\theta_3^2} - \frac{\theta_2^2}{4q'\theta_3^2}, \quad pq' < 0$$

通过所得到的以上一维非线性 Schrödinger 方程和 ϕ^4 场方程的解, 并结合所采用的函数与变量, 便可得出二维非线性 Schrödinger 方程的解。若将上述 ϕ^4 场方程的解代入变换式 (7.177) 中, 则可得到自相似二维方程的孤子解为

$$\phi = \pm \frac{1}{t'} \exp \left[i \left(\frac{x'^2}{4pt'} + \frac{y'^2}{4q't'} - \frac{\omega}{t'} \right) \right] \times \begin{cases} \sqrt{\frac{2\omega}{b}} \operatorname{sech} \sqrt{\frac{\omega}{p+q'c_1^2}} \left(\frac{x'}{t'} - c_1 \frac{y'}{t'} - \zeta_0 \right) & \text{对于 } \frac{\omega}{p+q'c_1^2} > 0, \frac{b}{p+q'c_1^2} > 0 \\ \sqrt{\frac{\omega}{b}} \tanh \sqrt{\frac{-\omega}{2(p+q'c_1^2)}} \left(\frac{x'}{t'} - c_1 \frac{y'}{t'} - \zeta_0 \right) & \text{对于 } \frac{\omega}{p+q'c_1^2} < 0, \frac{b}{p+q'c_1^2} > 0 \end{cases} \quad (7.178)$$

这一解是由 Nakamura 等人得到的。Tajiri 等人应用以上类似的方法求出了三维非线性 Schrödinger 方程的解, 这里不再叙述。

7.11 在扰动作用下高维 Schrödinger 方程的解法

7.11.1 Gaididei 等的求解方法

Gaididei 等人, Desyatniko 等人, Infel, Rowlands, Pokrovsky, Talopov, Germanschewski 等人和 Konopelchenko 等人得到过二维和三维非线性 Schrödinger 方程的解。在动力

学激发密度较低时, Gaididei 等人研究过在杂质势作用下二维非线性 Schrödinger 方程的解。他将杂质局域于一个由许多粒子组成的二维晶格系中的原点0去替代晶格中的粒子。于是此时晶格会发生变化, 但他假设此时仍未畸变整个晶格系统, 并将此系统中的微观粒子的动力学方程写成

$$i\hbar\phi_t + \frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\phi + b|\phi|^2\phi = E(\vec{r})\phi \quad (7.179)$$

式中,
$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \quad \text{和} \quad \int |\phi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = 1 \quad (7.180)$$

在式(7.179)中的 $E(\vec{r})$ 是单一元激发的能量 E_n 的一个连续性近似值, 它决定了在杂质分子附近产生一个激发的能量大小, 并用一个具有轴向对称的 Gaussian 函数来表示, 即

$$E(\vec{r}) = Ee^{-(\vec{r}/r_0)^2} \quad (7.181)$$

此处的 E 是杂质的能量, r_0 是杂质的半径。现让

$$\vec{\rho} = \frac{\vec{r}}{r_0}, \quad \tau = \frac{\hbar t}{2mr_0^2}, \quad \varphi = \sqrt{\frac{2mbr_0^2}{\hbar^2}}\phi, \quad \dot{\varphi} = \frac{2mEr_0^2}{\hbar^2}$$

则式(7.179)在式(7.181)的条件下变为

$$i\varphi_\tau + \nabla^2\varphi + |\varphi|^2\varphi = V(\rho)\varphi \quad V(\rho) = \dot{\varphi}e^{-\rho^2} \quad (7.182)$$

此时 $\dot{\varphi}$ 表示了杂质的强度, 而

$$\int |\varphi|^2 d\vec{\rho} = N \quad (7.183)$$

Gaididei 等人研究了在杂质附近的孤子的动力学方程特性。在一般情况下, 二维非线性 Schrödinger 方程存在一些亮涡旋孤子解, 即一个具有内部激发(旋度)的局域态, 同时它还伴随有一个不稳定(即可色散又可坍塌)的状态。在这两种状态之间用一个宽度不随时间变化的所谓基态分开。在 $V=0$ 的式(7.182)的基态解可近似写成

$$\varphi_s = B_s \operatorname{sech}\left(\frac{\rho}{A_s}\right) e^{i\tau} \quad (7.184)$$

如果粒子开始时 $\rho=0$ 并处于静止状态, 则基态的振幅 B_s 和宽度 A_s 可表示成

$$B_s = \sqrt{\frac{12 \ln 2}{4 \ln 2 - 1}}, \quad A_s = \sqrt{\frac{2 \ln 2 + 1}{6 \ln 2}} \quad (7.185)$$

将式(7.184)代入式(7.183), 可得到 $N = N_s = 11.7$ 。当初始条件为 $\varphi = \varphi(\rho, 0)$, 而

N 又大于 N_s 时, 二维非线性 Schrödinger 方程式 (7.182) 的解为 $\varphi = \varphi(\rho, \tau)$ 可以随时间而色散或坍塌。

为了研究微观粒子在杂质附近的运动情况, Gaididei 等人假设杂质的半径 r_0 比粒子的宽度大得多, 于是杂质势 $V(\rho)$ 可展开为 ρ 的级数。在仅保留二阶项时, 可表示为 $V(\rho) \approx \alpha(1 - \rho^2)$ 。则该问题就退化为粒子在一个二维抛物线势 $V(\rho, \tau) = -\alpha(\tau)\rho^2$ 中运动的问题, 这里 $\alpha(\tau)$ 是时间的任意函数。在激发粒子的质心处于静止的非惯性坐标系中, 可以得到

$$\varphi(\vec{\rho}, \tau) = \Phi(\vec{\rho}, \tau) \exp \left\{ \frac{i}{2} \dot{\vec{R}} \cdot \vec{\rho} - \frac{i}{4} \int_0^\tau \left[\dot{\vec{R}}(\tilde{\tau})^2 + \varepsilon(\tilde{\tau}) \vec{R}^2(\tilde{\tau}) \right] d\tilde{\tau} \right\} \quad (7.186)$$

式中, $\vec{R} = \frac{1}{N} \int \vec{r} |\varphi(\vec{r}, \tau)|^2 d\vec{r}$ 是微观粒子的质心的位置; $\vec{\rho}' = \vec{\rho} - \vec{R}(\tau)$ 是粒子在新参考系中的坐标, $\dot{\vec{R}} = \partial \vec{R} / \partial \tau$, 则有

$$\ddot{\vec{R}} - 4\varepsilon(\tau)\vec{R} = \vec{0} \quad (7.187)$$

$$\text{和} \quad i\Phi_\tau + \nabla_{\rho'}^2 \Phi + |\Phi|^2 \Phi + \alpha(\tau)\rho'^2 \Phi = 0 \quad (7.188)$$

方程式 (7.187) 和式 (7.188) 表明在抛物线势场中的微观粒子的外部自由度(质心位置 \vec{R}) 和内部自由度 $\Phi(\vec{\rho}, \tau)$ 是可分开的, 粒子的势场是一个谐振势。当所受的势场 $V(\rho)$ 的非谐振势导致了内部和外部自由度的耦合时, 其微观粒子的质心运动像一个随时间变化的振子。为了研究在杂质场中微观粒子的内部自由度的运动特点, 现引入如下的变量的透镜变换:

$$\Phi(\vec{\rho}, \tau) = \frac{1}{a(\tau)} \Phi'(\xi, T) \exp \left[i \left(T + \frac{\dot{a}}{4a} \rho'^2 \right) \right] \quad (7.189)$$

这里 $a(\tau)$ 是微观粒子的宽度, 而 $\xi = \frac{|\rho'|}{a(\tau)}$, $T = \int_0^\tau \frac{d\tilde{\tau}}{a^2(\tilde{\tau})}$ 和 $\dot{a} = \frac{da}{dt}$ 是新的空间和时间变量。

将式 (7.189) 代入式 (7.188), 可得

$$i\Phi'_T + \left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right] \Phi' + |\Phi'|^2 \Phi' - \Delta \xi^2 \Phi' - \Phi' = 0 \quad (7.190)$$

$$\text{其中,} \quad \Delta = \frac{1}{4} a^3 \ddot{a} - \alpha(\tau) a^4 \quad (7.191)$$

如果 Δ 是一个正常数, 在 $\phi_\tau = 0$ 时式 (7.190) 变为

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \Phi' - \Delta \xi^2 \Phi' + |\Phi'|^2 \Phi' - \Phi' = 0 \quad (7.192)$$

在 $\Delta > 0$ 时, 做 $\xi \rightarrow \xi/\Delta^{1/4}$, $\Phi' \rightarrow \Delta^{1/4}\Phi'$ 变换后, 则从式(7.192)可得

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi}\right) \Phi' + (|\Phi'|^2 - \xi^2) \Phi' = \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \Phi' \quad (7.193)$$

相应的能量为
$$E = \int \left[\left| \frac{\partial \Phi'}{\partial \xi} \right|^2 - \frac{1}{2} |\Phi'|^4 + \xi^2 |\Phi'|^2 + \frac{1}{\sqrt{\Delta}} |\Phi'|^2 \right] d\xi \quad (7.194)$$

设尝试解为
$$\Phi' = \sqrt{\frac{N}{2\pi \ln 2}} \frac{1}{\beta} \operatorname{sech}\left(\frac{\xi}{\beta}\right) \quad (7.195)$$

这里 β 是一个变分参量。现将式(7.195)代入式(7.194), 并对 E 相对于 β 求极值, 可得到

$$\beta^4 = \Delta = \frac{4}{27} \left(1 - \frac{N}{N_s}\right) \cdot \frac{1 + 2 \ln 2}{\zeta(3)}$$

这里 ζ 是 Riemann Zeta 函数, 而 $N_s = 4\pi \ln 2 (2 \ln 2 + 1) / (4 \ln 2 - 1) \approx 11.7$ 是基态的激发数。当 $N < N_s$ 时, 若用原坐标来表示的式(7.188)的孤子解时, 它可写成

$$\Phi = \frac{1}{a(\tau)} \sqrt{\frac{N}{2\pi \ln 2}} \operatorname{sech} \xi \exp \left[i \left(T + \frac{\dot{a}}{4a} \rho'^2 \right) \right] \quad (7.196)$$

由于在抛物线势 $V(\rho, \tau) = -\dot{\alpha}(T)\rho^2$ 下的微观粒子的动力学特性虽然可用质心方程式(7.187)和孤子宽度的方程式(7.191)来表示, 但这两个方程属于 Ermakov-Pinney 方程, 故它们的解由 Pinney 表示为

$$a(t) = \left[u^2(t) + \frac{4\Delta}{W^2} v^2(t) \right]^{1/2} \quad (7.197)$$

此时, $W = \dot{u}v - u\dot{v}$ 是 Wronskian 函数, 而 (u, v) 是各自的线性方程 $\ddot{y} - 4\varepsilon(t)y = 0$ 的基础解。但就质心而言, 它与方程式(7.187)是一致的。如果

$$\dot{\alpha}(\tau) = -\frac{\Omega_0^2}{4} \equiv -\frac{2m|E|r_0^2}{\hbar^2} = \text{constant} \quad (7.198)$$

则此时的杂质是一个激发的“吸收”者。将式(7.198)代入式(7.187)和式(7.197), Gaididei 得到

$$R(t) = R_0 \cos[\omega(t + t_0)]$$

$$a^2(t) = A^2 \cos^2[\omega(t + t_1)] + \frac{\hbar^2 \Delta}{2m|E|r_0^2 A^2} \sin^2[\omega(t + t_1)]$$

式中, R_0 , A , t_0 和 t_1 是一些任意常数; $\omega = \sqrt{2|E|m}/r_0$ 是质心的振动频率, 其孤子的

宽度 $a(t)$ 以频率 2ω 振荡, ω 依赖于杂质的强度 $|E|$ 和半径 r_0 及微观粒子的质量。如果杂质的半径 r_0 比孤子的宽度大, 即 $a > 1$, 则上述方法是正确的。如果

$$\ddot{\alpha}(\tau) = -\frac{\Omega_0^2}{4} [1 + h \cos(\Omega\tau)] \quad (7.199)$$

则吸收杂质分子以频率 Ω 绕着平衡位置振荡。于是吸收者或者做平移或者做振动运动, 其参数 h 是正比于杂质振荡的振幅。现将式 (7.199) 代入式 (7.187), 可得

$$\ddot{R} + \Omega_0^2 [1 + h \cos(\Omega\tau)] R = 0 \quad (7.200)$$

这是 Mathieu 方程。在 (Ω_0, h) 平面上可把它的解分为稳定区 [在此区域当 τ 接近于无穷大时, $R(\tau)$ 能保持有限] 和不稳定区 (其时出现了参数共振)。在 $|\Omega - 2\Omega_0| < \Omega_0 h/2$ 的第一共振区, 方程式 (7.200) 的近似解可表示成

$$R(\tau) = R_0 \left\{ e^{\gamma\tau} \cos[\Omega(\tau + \tau_0)] + e^{-\gamma\tau} \sin[\Omega(\tau + \tau_0)] \right\} \quad (7.201)$$

式中, R_0 和 τ_0 是依赖于微观粒子的初始位置和初始速度的常数; γ 为

$$\gamma = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\Omega_0 h}{2} \right)^2 - (\Omega - 2\Omega_0)^2 \right]^{1/2} \quad (7.202)$$

从式 (7.201) ~ 式 (7.202) 可以看出, 当吸收者绕着它的平衡位置振荡时, 它不可能使微观粒子陷落。其微观粒子的振荡振幅随放大系数 γ 增加而指数增大。Gaididei 等人使用分步傅里叶法数值计算方法标示了式 (7.200) 的解, 其结果与上述的解析解一致。

7.11.2 Desyatnikov 等人的求解方法

Desyatnikov 等人研究了如下的三维 $\phi^4 - \phi^6$ 非线性 Schrödinger 方程

$$i\phi_t + \nabla^2 \phi + |\phi|^2 \phi - |\phi|^4 \phi = 0 \quad (7.203)$$

的解, 这里 $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} + \frac{\partial^2}{\partial z'^2}$, 而 $t' = t/\hbar$, $x' = x\sqrt{2m}/\hbar$, $y' = y\sqrt{2m}/\hbar$, $z' = z\sqrt{2m}/\hbar$ 。

在二维情况下 Quiroga-Teixeiro, Michiney 曾求出过上述方程的涡旋解, 并用数值模拟证明它们是十分稳定的。Kruglov 等人求出了该方程的螺旋涡旋解, 它的振幅在沿传播方向是周期性调制的, 但它自身却是不稳定的。该方程具有的平方非线性性质的二维涡旋孤子解虽然存在, 但具有强的方位不稳定性。在三维情况下, 数值计算表明式 (7.203) 有三维孤子解。Desyatnikov 等人对它的性质进行了研究。他们设 $r = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}$, 并将式 (7.203) 的解表示为

$$\phi(x', y', z', t) = e^{ikt'} \varphi(\vec{r}) \quad (7.204)$$

将其代入式 (7.203), 可得

$$\varphi_{rr}(\vec{r}) + \frac{2}{r}\varphi_r(\vec{r}) - k\varphi(\vec{r}) + \varphi^3(\vec{r}) - \varphi^5(\vec{r}) = 0 \quad (7.205)$$

它在边界条件下的渐近形式现表示成

$$\varphi(\vec{r}) \approx a(k)(1 + cr^2), \text{ 在 } r \rightarrow 0 \text{ 时和 } \varphi(\vec{r}) \approx \frac{B(k)}{r}e^{-\sqrt{k}r}, \text{ 在 } r \rightarrow \infty \text{ 时} \quad (7.206)$$

式中, $c = (a^4 - a^2 + k)/6$, $a(k)$ 和 $B(k)$ 是 k 的函数。

Desyatnikov 等人用数值计算的方法求出了对于不同 k 值下的式 (7.105) 的解, 其结果如图 7.2 所示。从图中看到孤子的有效大小随 k 的增加而增大, 这造成了在孤子质心处的场的平坦分布。这相当于在式 (7.206) 中曲率参数 c 的减少。当 $c=0$ 时, 孤子的振幅 $a(k)$ 在 $r=0$ 时接近于两个极限值 $a_{1,2}(k) = \pm\sqrt{1+\sqrt{1-4k}}/2$ 。

在任意维情况下, 当 k 的值取类似于以上边界值时, 这一孤子解也存在。在一维情况下, 式 (7.203) 不是式 (7.205), 而是下列方程:

$$\varphi'' - k\varphi + \varphi^3 - \varphi^5 = 0$$

它有一个如下的孤子解:

$$\varphi^2(x') = \frac{4k}{1 + \sqrt{1 - (16/3)k} \cosh[2\sqrt{k}(x' - x'_0)]}$$

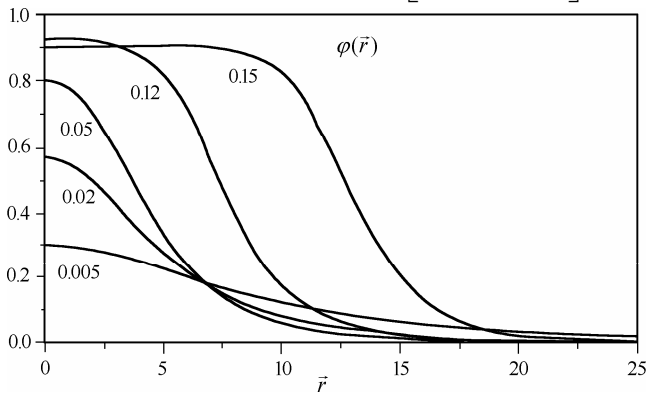


图 7.2 式 (7.205) 的零自旋孤子解, 其中传播参数 k 的值标在曲线附近。

除了 $-a_1$ 是被 k 代替外, 此解与式 (7.150) 一致。如果取 $k < k_{\max}^{(1D)} = 3/16$ 时, 这个解是存在的。在二维时, 使用相同的方法可求得 $k_{\max}^{(2D)} \approx 0.18$ 。如果取 $k_{\max}^{(3D)} < k_{\max}^{(2D)} < k_{\max}^{(1D)}$ 时, 式 (7.205) 也有孤子解存在, 但相应的上边界条件随空间维度的增加而减少。而此方程的三维孤子的一个最重要的物理特征是它的能量可表示成 $E(k) = 4\pi \int_0^{+\infty} \varphi^2(\vec{r}; k) \vec{r}^2 d\vec{r}$ 。

在二维时, 此孤子是一个空间圆柱状的波束。它的能量在 $k=0$ 时达到一个有限值 $E_{\min}^{(2D)} \approx 11.75$ 。在一维时, 此孤子在 $k \rightarrow 0$ 时的能量也趋于 0。在三维时, 当 $k \rightarrow 0$ 时

此孤子的能量是发散性的，这是三维零自旋孤子要求能量最小化的结果，它的数值是 $E_{\min}/4\pi \approx 15$ 。因此，在三维情况下， $E(k)$ 与 k 的关系具有一个 U 型依赖性。这意味着在每一个能量值 $E > E_{\min}$ 时，对于不同的 k 值，存在两类不同的孤子解。这是三维情况下此方程的解的一个显著特点。

对于三维的式 (7.203) 能够使用球形空间坐标去构成一个具有整数磁量子数 $m \neq 0$ 的三维孤子解，其形式为

$$\varphi(x', y', z', t') = e^{ikt' + im\tilde{\varphi}} \varphi(r', \theta) \quad (7.207)$$

这里 $\cos\theta \equiv z/r$ ，而 $\tilde{\varphi}$ 是粒子的位置矢量 \vec{r} 在横向平面 (x, y) 上的投影与 x 轴的夹角，则式 (7.203) 变成

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \varphi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right) - \frac{m^2 \varphi}{r^2 \sin^2 \theta} - k\varphi + \varphi^3 - \varphi^5 = 0 \quad (7.208)$$

可以用以下的尝试来表示式 (7.208) 的 3D 螺旋孤子

$$\varphi(r, \theta) = \Phi(r) \sin\theta \quad (7.209)$$

将式 (7.209) 代入式 (7.208)，再对 θ 进行积分，则可得

$$\frac{d^2 \Phi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\Phi}{dr} - 2 \frac{\Phi}{r^2} - k\Phi + \frac{4}{5} \Phi^3 - \frac{24}{35} \Phi^5 = 0 \quad (7.210)$$

对于不同 k 值的式 (7.210) 的解在图 7.3 中表示。由图 7.3 可以看到，其解是一个螺旋孤子。这些解是将 $\Phi(r)$ 的边界条件调整到在 $r \rightarrow 0$ 时是线性趋于零的情况，而在 $r \rightarrow \infty$ 时是指数增加的初始条件下，他们用抛掷(shooting)方法数值求出了解。从图中发现在 $r = 0$ 时， $\Phi(r)$ 的斜率随 k 增加到迅速增加，直至达到最大值 $k = 0.09$ ，但在此以后又减少(在二维情况下，当 $k = 0.145$ 时它达到最大值)。这个螺旋孤子式 (7.207) 的能量为

$$E = 2\pi \int_0^{+\infty} \vec{r}^2 d\vec{r} \int_0^\pi \varphi^2(\vec{r}, \theta) \sin\theta d\theta \quad \text{或} \quad E(k) = \frac{8\pi}{3} \int_0^{+\infty} \varphi^2(\vec{r}, k) \vec{r}^2 d\vec{r} \quad (7.211)$$

其第二式给出的能量是传播参数 k 的函数，在 $k = k_{cr} \approx 0.033$ 时，孤子的能量达到一

个最小值 $E_{\min}/4 = 62.6$ ，它局域在 $k = k_{cr} \approx 0.033$ 。这暗示了具有 $m=1$ 的螺旋孤子在 $k > k_{cr}$ 时是稳定的。当 k 超过一最大值 $k_{\max}^{(3D)} \approx 0.15$ 时，方程式 (7.210) 再无孤子解。但在这个区域的上边界处，存在一个零自旋的孤子解。它的多维孤子解的上边界并不强烈依赖于自旋值，而是依赖于系统的空间维度。Desyanikov 等人证明了 $m=0$ 的二维孤子解几乎与 $m=1$ (此时 $k_{\max}^{(2D)} \approx 0.18$) 的孤子解一致。

在二维情况下， $m=0$ 和 $m=1$ 的两个孤子的最小能量比值是 $50/11.75 \approx 4.26$ (对

$m=1$ 的孤子是 $E_{\min}^{2D}=50$ ，对 $m=0$ 的零自旋孤子是 $E_{\min}^{2D}=11.75$ 。在三维情况下，其相应的比值为 $62.5/15=4.17$ 。可以证明在任何维度的情况下，形成的自旋孤子所需要的能量则是无自旋孤子的 4 倍。因此，从实验上产生可观察到的自旋孤子比产生无自旋孤子更困难。Desyatnikov 等人在柱坐标 (ρ, φ, τ) 下给出式 (7.205) 的孤子解为

$$\varphi(\rho, \tau) = \Phi(\rho) \operatorname{sech}(\mu \tau') \quad (7.212)$$

这个 $\Phi(\rho)$ 解的形式示于图 7.3 中。所求出的这些孤子解也具有以上的孤子特性。

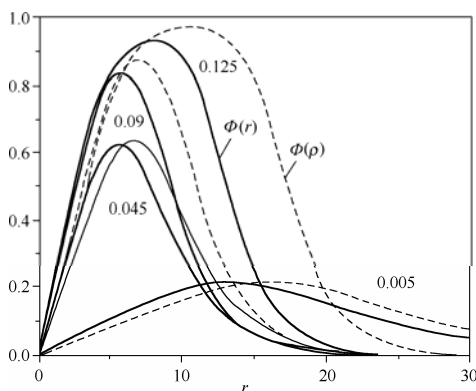


图 7.3 在 $m=1$ 时，出现的三维自旋孤子解，其中的实线和虚线分别表示在式 (7.209) 和式 (7.212) 中 $\Phi(r)$ 和 $\Phi(\rho)$ 的值，它们具有相同的 k 值，并且在图中已标出

习题

说明：以下有些习题(*)较难做，请根据实际情况选择较简单的完成。

1. 应用行波法求解 $i\hbar\phi_t + \frac{\hbar^2}{2m}\phi_{xx} + b|\phi|^2\phi + c\phi = 0$ 的解。
2. 总结用反散射方法求解非线性 Schrödinger 方程孤子解基本过程和所用的一些物理概念。
3. 用自动 Bäcklund 变换法求 $\phi_{xx} - \phi_u = \sin\phi$ 方程的解。
4. 用 Hirota Bäcklund 变换法求出 $\phi_{xx} = \sin\phi$ 方程对应的态的叠加公式。
- *5. 用自相似变换式 (7.152) 将二维方程 $i\phi_t + p\phi_{xx} + q\phi_{yy} + b|\phi|^2\phi + c\phi = 0$ 降为一维波动方程来求解。

第 8 章 非线性量子力学理论的应用

本章列出有机分子、生物分子和氢键系统等一些典型的物理系统，研究其中的激子和质子及声子等微观粒子的非线性量子力学特性及其具体的求解方法。借此，以使我们能从中领会到非线性量子力学问题的研究方法。

8.1 在有机分子中激子的非线性量子力学特性

8.1.1 有机分子的乙酰苯胺的分子结构及其产生的激子的特点

乙酰苯胺(acetanilide)是一种有机分子，可简写为 ACN，它的分子式为 $(\text{CH}_3\text{CO}-\text{HNC}_6\text{H}_5)\text{X}$ ，其中由 N, C, H 和 N 组成的两条肽群(CONH)靠其中的氢链构成两条长链跑遍于整个分子。其中的固体物理学元胞的分子结构如图8.1所示。它的空间群为 $D_{2h}^{15}(\text{P}_{\text{bca}})$ ，元胞或子群为 D_{2h} 。此结构的平均晶格常数为 $a = 1.9640 \text{ nm}$, $b = 0.9483 \text{ nm}$, $c = 0.9979 \text{ nm}$ 。在每个元胞中有 8 个分子。每个分子都有一个自由度(d.f)，因此它包含有 3 个红外激活模(B_{1u}, B_{2u}, B_{3u})，4 个 Raman 激活模(A_g, B_{1g}, B_{2g} 和 B_{3g})和 1 个未激活模 A_u 。但在低频($<200 \text{ cm}^{-1}$)时，每个分子就有 6 个自由度(3 个平移，3 个转动模)。于是 ACN 则有 48 个低频模，其中 24 个 Raman 模、18 个红外激发模和 6 个 A_u 相分别相应于平移和转动的声学模。所有这些振动模可在 ACN 的红外和 Raman 光谱中观察到。由于每一个氢键 amide-I 系统非常灵敏于它的键长，因此，研究它的非线性激发有助于揭示一些新的现象的本质。例如在红外吸收和 Raman 散射中观察到，当晶态的乙酰苯胺从 320 K 冷却到 10 K 时，amide-I 带从它的主峰 1666 cm^{-1} 红移到 1650 cm^{-1} ，共移动了 16 cm^{-1} 。但在 $800 \sim 4000 \text{ cm}^{-1}$ 中的其他峰值在这种温度变化下没有变化。同时发现，新峰 1650 cm^{-1} 的红外和 Raman 谱的强度从室温减少到 170 K 时是稳定增加的，但在非晶体态的 ACN 中， 1650 cm^{-1} 新峰消失，其氢键增长。但在退火之后， 1650 cm^{-1} 带又会出现。在它的红外吸收和 Raman 散射实验中都可观察到类似的现象。

如我们所知，在乙酰苯胺中的 CONH 肽群的基本特征就是 amide-I 模的存在，它们的本质就是 C=O 键的伸缩振动。在 ACN 中它的本征振动频率刚好为 1666 cm^{-1} 。

关于新带 1650 cm^{-1} 的谱实验证据早有人提起。详细的晶体结构分析和比热容测

定排除将这一新带分配到 (a) amide-I 的一般振动模, 或 (b) 晶体缺陷态, 或 (c) 费米共振态, 或 (d) 在两个子系统之间的凝聚动能。由于有以下实验支持, 即 (a) ^{15}N 的替代导致了在 1666 cm^{-1} 的 amide-I 模的移动, 同时也使这新带移动了相同的值; (b) 当用氘 (D) 代替 NH 中的 H 时, 不但强烈影响 amide-I 带, 也影响了这个新带; (c) 实验观察到在温度下降时, 可使 amide-I 的 1666 cm^{-1} 带的强度下降, 但 1650 cm^{-1} 新带的强度增加; (d) 1650 cm^{-1} 和 1666 cm^{-1} 带在整个温度范围内具有相同的二向色性; (e) 在 ACN 的比热容、介电常数和体积膨胀与温度的关系的测定中表现转动异构体或多形态的转变存在。后者既可以影响红外吸收, 又可以影响 Raman 散射, 但不影响这个新带。对此, Scott 和 Eilbeck 等人根据 Davydov 思想提出了这个新带是由于 amide-I 振动激发能量的自陷引起孤子的出现所产生的想法。应用这一理论他们给予了此系统的第一次激发态特性的很好解释。基于第 6 章给出的 Davydov 的激子理论, Alexamder 和 Krumbansl 推出了该有机分子的红外吸收强度随温度变化按指数 $e^{-\beta T^2}$ 的规律减少的结果, 它刚好与上述红外吸收和 Raman 散射的实验结果吻合。他们进一步把 amide-I 振动激活产生的量子叫做激子, 它相当于 1666 cm^{-1} 谱线, 而把新带 1650 cm^{-1} 归结为一孤子的产生, 这个孤子是由于激子的自陷形成的。从红外吸收谱上观察到的 16 cm^{-1} 的红移恰好就是由于激子的自陷引起的能量减少值, 于是它就是所形成的孤子的束缚能。但 Davydov 理论给出的孤子束缚能太小, 因此不能很好地解释这个实验的所有结果。至此许多人对它做了不同的改进, 庞小峰与其合作者认为这个新带是由 amide-I 振动量子(振子或激子)与晶格声子的相互作用导致了激子的自陷引起的, 从而提出了 ACN 的振子模型来研究激子的非线性量子力学特性。

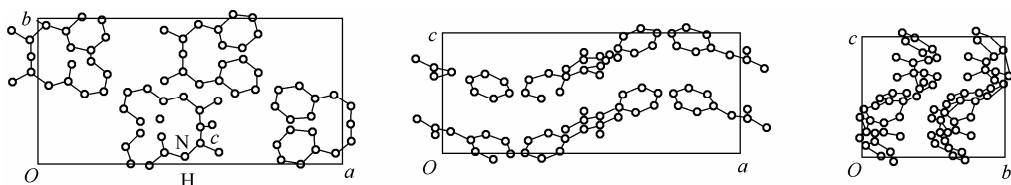


图 8.1 ACN 的固体物理学元胞的分子结构, 这里 $a = 0.1964\text{ nm}$, $b = 0.0948\text{ nm}$, $c = 0.07979\text{ nm}$

8.1.2 有机分子中的非线性激发满足非线性 Schrödinger 方程

在这种振子模型中, 庞小峰把 amide-I 振子和由它引起的肽群 (CONH) 的声学振动及它们之间的相互作用对应的系统的哈密顿量写成

$$H = H_{\text{ex}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}} = \frac{1}{2m} \sum_n p_n^2 + \frac{m\omega_0^2}{2} \sum_n r_n^2 + \frac{m\omega_1^2}{2} \sum_n r_n r_{n+1} +$$

$$\frac{1}{2M} \sum_n P_n^2 + \frac{\beta}{2} \sum_n (R_n - R_{n-1})^2 + m\chi_1 \sum_n (R_{n+1} - R_{n-1}) r_n^2 +$$

$$m\chi_2 \sum_n (R_{n+1} - R_n) r_n r_{n+1} - m\chi_2 \sum_n (R_{n-1} - R_n) r_n r_{n-1} \quad (8.1)$$

这个哈密顿函数包含了由局域性涨落引起的 **amide-I** 的振动激发和由分子链的结构畸变引起的分子晶格的声学振动以及这两个运动模式之间的相互作用。式(8.1)中的 m 和 M 分别表示振子或激子和肽群的质量； ω_0 和 ω_1 分别为振子的动力学矩阵元的对角和非对角部分， ω_0 也是振子的爱因斯坦振动频率； r_n 和 p_n 分别是第 n 个振子的位置和它的共轭动量； R_n 和 P_n 分别是分子或肽群的位置和共轭动量算符； $\chi_1 = \partial\omega_0^2 / \partial R_n$ 和 $\chi_2 = \partial\omega_1^2 / \partial R_n$ 分别表示了振子的振动能量和偶极-偶极相互作用能在肽群的单位伸长后的变化。其中 H_{ex} 、 H_{ph} 和 H_{int} 分别表示振子(激子)、声子和它们之间的相互作用的哈密顿量。这个哈密顿量不同于其他模型的哈密顿量。在此模型中应用了 **amide-I** 振子的振动频率同分子位移有关的谐振模型去描述这个振子的运动。这个振动既考虑了非对角因子的效应，又考虑了与分子的位移的关系。于是振子的振动频率可表示为

$$\begin{aligned} \omega_0^2(R_n) &\approx \omega_0^2 - \frac{\partial\omega_0^2}{\partial R_n}(R_n - R_{n-1}) = \omega_0^2 + \chi_1(R_n - R_{n-1}) \\ \omega_1^2(R_n) &\approx \omega_1^2 + \chi_2(R_n - R_{n-1}) \end{aligned}$$

如果将这个表示式代入到振子的哈密顿量，并考虑振子相邻分子的相互作用，便可自然得到式(8.1)。因此，上述哈密顿函数的物理意义非常清楚。就相互作用而言，这个模型具有高度对应性，于是它能很好地描述乙酰苯胺中的集体激发现象。由于 **amide-I** 振子的振动和分子的位移是量子化的，于是应对它们进行如下的量子化：

$$r_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(b_n^+ + b_n), \quad p = -i\sqrt{\frac{2m\omega_0}{\hbar}}(b_n - b_n^+) \quad i = \sqrt{-1} \quad (8.2)$$

$$R_n = \sum_q \left[\frac{\hbar}{2NM\omega_q} \right]^{1/2} e^{iqnr_0} (a_{-q}^+ + a_q), \quad P_n = i \sum_q \left[\frac{M\hbar\omega_q}{2N} \right]^{1/2} e^{iqnr_0} (a_{-q}^+ - a_q) \quad (8.3)$$

式中， $\omega_q = 2(\beta/M)^{1/2} \sin(r_0 q/2)$ 是具有波矢为 q 的声子的频率； N 是分子链中单元胞的数目； $b_n^+(b_n)$ 和 $a_q^+(a_q)$ 分别为振子(激子)和声子的产生(消失)算符。

使用式(8.2)和式(8.3)，则式(8.1)变成

$$H = \sum_n \hbar \omega_0 \left(b_n^+ b_n + \frac{1}{2} \right) - J \sum_n (b_n^+ b_{n+1} + b_n b_{n+1}^+) + \sum_q \hbar \omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) +$$

$$\sum_{n,q} [g(q)(b_n^+ b_n + b_n b_n^+) + g_1(q)(b_n^+ b_{n+1} + b_n b_{n+1}^+) - g_2(q)(b_n^+ b_{n-1} + b_n b_{n-1}^+)] (a_q + a_{-q}^+) e^{i n r_0 q} \quad (8.4)$$

式中, $\dot{\phi}_0 = \hbar \omega_0$, $J = \hbar \omega_1^2 / 4 \omega_0$, $g(q) = \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_q} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\hbar \chi_1}{2\omega_0} \right) [e^{i r_0 q} - e^{-i r_0 q}]$

$$g_1(q) = \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_q} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar \chi_2}{2\omega_0} \right) [e^{i r_0 q} - 1], \quad g_2(q) = \left(\frac{\hbar}{2NM\omega_q} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar \chi_2}{2\omega_0} \right) [e^{-i r_0 q} - 1]$$

在此系统中的振子(激子)和声子的集体激发具有相干的特点。为了表征这种特性,同时又要保持整个系统中激子数目的守恒性,则庞小峰选用了以下系统的集体激发波函数:

$$|\Phi\rangle = |\varphi(t)\rangle U(t) |0\rangle_{\text{ph}} = \frac{1}{\lambda'} \left(1 + \sum_n \varphi_n(t) b_n^+ \right) |o\rangle_{\text{ex}} \cdot U(t) |o\rangle_{\text{ph}} \quad (8.5)$$

这里, $U(t) = \exp \left\{ \sum_n \frac{1}{i\hbar} [u_n(t) P_n - \pi_n(t) R_n] \right\}$ (8.6)

或 $U(t) = \exp \left\{ \sum_q [\alpha(t) a_q^+ - \alpha_q^*(t) a_q] \right\}$

式中, $|o\rangle_{\text{ex}}$ 和 $|o\rangle_{\text{ph}}$ 分别为激子和声子的基态, λ' 是归一化常数。为了方便,这里选择 $\lambda' = 1$ 。很明显, $\varphi_n(t)$, $u_n(t) = \langle \Phi | R_n | \Phi \rangle$ 和 $\pi_n(t) = \langle \Phi | P_n | \Phi \rangle$ 是三个未知的函数,这里激子的波函数为

$$|\varphi\rangle = \frac{1}{\lambda'} \left(1 + \sum_n \varphi_n(t) b_n^+ \right) |0\rangle_{\text{ex}} \quad (8.7)$$

它既不是单粒子激发态,也不是标准的相干态,而是一个标准相干的级数展开式的前两项,则在 $|\varphi_n| \ll 1$ 时,它能近似表示为一个标准的相干态,即具有如下特性:

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &\approx \frac{1}{\lambda'} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right] \exp \left[\sum_n \varphi_n(t) b_n^+ \right] |o\rangle_{\text{ex}} \\ &= \frac{1}{\lambda'} \exp \left[\sum_n \varphi_n(t) b_n^+ - \varphi_n^*(t) b_n \right] |o\rangle_{\text{ex}} \end{aligned} \quad (8.8)$$

于是我们能称它为一个准相干态。由于这种推导要求 $\sum_n |\varphi_n| = 1$, 对于由几百个分子组成的分子链,则上述条件 $|\varphi_n| \ll 1$ 是自动满足。于是,上述结果的表示式自然成立。由于在 $\lambda' = 1$ 时式(8.8)的后一式是归一化的,因此这个波函数是归一化的。但这个准相

干态不是粒子数算符 $\hat{N} = \sum_n b_n^\dagger b_n$ 的本征态, 因为 $\hat{N}|\varphi\rangle = \sum_n b_n^\dagger b_n |\varphi\rangle = |\varphi\rangle - |o\rangle_{\text{ex}} \neq |\varphi\rangle$ 的缘故。但它包含的粒子数是确定和有限的。由公式 $N = \langle\varphi|\hat{N}|\varphi\rangle$ 可求得 $N = 1$, 即此波函数仅包含一个激子。因此庞小峰的系统波函数具有相干性, 能很好地描述激子和声子集体激发的相干特性。如果使用式(8.4)~式(8.6), 再从海森堡方程

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\Phi|b_n|\Phi\rangle = \langle\Phi|[b_n, H]|\Phi\rangle, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle\Phi|a_q|\Phi\rangle = \langle\Phi|[a_q^*, H]|\Phi\rangle \quad (8.9)$$

可以得到振子和声子的运动方程, 它们分别为

$$i\hbar \dot{\varphi}_n = \hbar\omega_0\varphi_n - J(\varphi_{n+1} + \varphi_{n-1}) + \sum_q \{2g(q)(\alpha_q + \alpha_{-q})\varphi_n + (g_1(q) - g_2(q))[(\alpha_q + \alpha_{-q}^*)\varphi_{n+1} + (\alpha_q + \alpha_{-q}^*)\varphi_{n-1}]\} e^{ir_0qn} \quad (8.10)$$

$$i\hbar \dot{\alpha}_q = \hbar\omega_q\alpha_q + \sum_n \{2g(q)|\varphi_n(t)|^2 + [g_1(q) - g_2(q)](\varphi_n^*\varphi_{n+1} + \varphi_n^*\varphi_{n-1})\} e^{-ir_0qn} \quad (8.11)$$

$$i\hbar \dot{\alpha}_{-q}^* = -\hbar\omega_q\alpha_{-q}^* - \sum_n \{2g(q)|\varphi_n(t)|^2 + [g_1(q) - g_2(q)](\varphi_n^*\varphi_{n+1} + \varphi_n^*\varphi_{n-1})\} e^{-ir_0qn} \quad (8.12)$$

从式(8.11)和式(8.12)可得

$$\ddot{\alpha}_{-q}^* + \ddot{\alpha}_q = -\omega_q^2(\alpha_q + \alpha_{-q}^*) - \sum_n \left\{ \frac{4g(q)\omega_q}{\hbar} |\varphi_n|^2 + \frac{2g_1(q) - 2g_2(q)}{\hbar} \omega_q (\varphi_n^*\varphi_{n+1} + \varphi_n^*\varphi_{n-1}) \right\} e^{-ir_0qn}$$

从式(8.3)可得到 $u_n = \langle\Phi|R_n|\Phi\rangle$ 的傅里叶变换为

$$u_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q u_q(t) e^{iqx}$$

其中 $x = nr_0$ 和 $u_q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_q}} (\alpha_q + \alpha_q^*)$ 。

利用此关系, 从上述方程式(8.11)和式(8.12)可以得到

$$\ddot{u}_q + v_0^2 q^2 u_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \left\{ \frac{2iq\hbar r_0 \chi_1}{M\omega_0} |\varphi_n|^2 + \frac{iq\hbar r_0 \chi_2}{M\omega_0} (\varphi_n^*\varphi_{n+1} + \varphi_n^*\varphi_{n-1}) \right\} e^{-ir_0qn}$$

这里使用了 $\omega_q \approx v_0 q$ 和 $v_0 = r_0(\beta/M)^{1/2}$ 。使用长波长近似和连续性近似, 从上式可求得

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} - v_0^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{2\hbar r_0(\chi_1 + \chi_2)}{M\omega_0} \frac{\partial |\varphi(x, t)|^2}{\partial x} \quad (8.13)$$

在连续性近似下, 利用上述关系式, 式(8.10)变成

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x,t)}{\partial t} = (\hbar\omega_0 - 2J)\varphi(x,t) - Jr_0^2 \frac{\partial^2 \varphi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{2\hbar r_0(\chi_1 + \chi_2)}{\omega_0} \varphi(x,t) \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \quad (8.14)$$

将式(8.13)代入式(8.14), 可得到微观粒子在此系统中运动的非线性 Schrödinger 方程为

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x,t)}{\partial t} = (\hbar\omega_0 - 2J)\varphi(x,t) - Jr_0^2 \frac{\partial^2 \varphi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{4\hbar^2 r_0^2 (\chi_1 + \chi_2)^2}{M\omega_0(v^2 - v_0^2)} |\varphi(x,t)|^2 \varphi(x,t) \quad (8.15)$$

此处 $\frac{\hbar^2}{2m} = Jr_0^2$ 。因此, 在 ACN 系统中的激子运动满足非线性 Schrödinger 方程, 于是可用非线性量子力学理论来研究它们的特性。此时, 方程式(8.15)的解可表示成

$$\varphi(x,t) = \sqrt{\frac{\mu}{2}} \operatorname{sech}[\mu'(x - x_0 - vt)] \exp\left\{\frac{i}{h}\left[\frac{\hbar^2 v(x - x_0)}{2Jr_0^2} - E_{\text{sol}}t\right]\right\} \quad (8.16)$$

$$u(x,t) = -\frac{\hbar(\chi_1 + \chi_2)}{2\omega_0\beta(1-s^2)} \tanh[\mu'(x - x_0 - vt)] \quad (8.17)$$

其中, 此系统的非线性相互作用系数为 G 或 μ , 它可以表示为

$$\mu = \frac{G}{4J}, \quad G = \frac{4\hbar^2 r_0^2 (\chi_1 + \chi_2)^2}{Mv_0^2 \omega_0^2 (1-s^2)}, \quad \mu' = \frac{\mu}{r_0}, \quad s = \frac{v}{v_0}, \quad \text{则 } \hbar\omega_0 - 2J, \quad \omega_0 = \hbar\omega_0$$

因此, 激子与声子之间的耦合效应大小与自身的特性相关。

如果使用 $\alpha_q = \sqrt{\frac{M\omega_q}{2\hbar}} u_q + i\sqrt{\frac{1}{2M\hbar\omega_q}} \pi_q$ 和以上关系, 可求出在式(8.6)的 $U(t)$ 中的

$\alpha_q(t)$ 为

$$\alpha_q(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \alpha_n(t) e^{-iqx} = \frac{i\hbar(\chi_1 + \chi_2)\pi M(\omega_q + vq)}{2Mv_0^2 \omega_0(1-s^2)\hbar N \omega_q} \sinh\left(\frac{\pi r_0 q}{2\mu}\right) e^{iqvt} = \alpha_q e^{iqvt} \quad (8.18)$$

所形成的激发孤子的能量为

$$E_{\text{sol}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar d\xi = \omega_0 - 2J + \frac{\hbar^2 v^2}{4Jr_0^2} - \frac{\mu^2 J}{3} = E_0 + \frac{M_{\text{sol}} v^2}{2} \quad (8.19)$$

其中, $\xi = x - x_0 - vt$, 而孤子的静止能量为 $E_0 = \epsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2(\chi_1 + \chi_2)}{3\beta^2 J \omega_0^4}$, 孤子的有效质量为

$$M_{\text{sol}} = m + \frac{4\hbar^4(\chi_1 + \chi_2)^4(1 - 3s^2/2 - s^4/2)}{3\beta^2 J \omega_0^4 v_0^2(1 - s^2)^2} > m$$

于是上述振子(激子)的孤子状态的能量和静止能量都分别低于其激子本身的能量和静止能量 $E' = E'_0 - 2J + \frac{1}{2}mv^2$ 和 $E'_0 = \epsilon_0 - 2J$ 大约为 $\hbar^2(\chi_1 + \chi_2)^4/3\beta^4 J \omega_0^4(1 - S^2)$ 和 $\hbar^4(\chi_1 + \chi_2)^4/3\beta^2 J \omega_0^4$ 值, 但前者的质量被增大。于是这个激子的孤子状态更加稳定。

从以上的研究看到, 在 ACN 分子系统中只要认真研究系统中的微观粒子的激子和晶格场本身的运动特性及它们之间的相互作用, 对它们进行同等处理, 则激子就会受到一种非线性相互作用。它使激子的特性发生了根本性的变化, 而被局域, 变成一个具有波-粒二象性的孤子, 并能用非线性 Schrödinger 方程来描述它们的运动状态。因此, 这个系统应该用非线性量子力学而不是用线性量子力学来描述。

庞小峰等人进一步研究了 ACN 分子中肽群的非谐振动对这个孤子的影响。这时在式(8.1)中的声子的哈密顿量现在是被

$$H'_{\text{ph}} = \frac{1}{2M} \sum_n P_n^2 + \sum_n \left[\frac{\beta}{2} (R_0 - R_{n-1})^2 + \frac{1}{3} \lambda_1 (R_n - R_{n-1})^3 \right] \quad (8.20)$$

代替, 此时发现在式(8.15)中 $(\hbar\omega_0 - 2J)\phi(x, t)$ 项发生了改变, 于是激子的孤子状态与相位、速度和能量及宽度发生了变化, 但孤子的本性没有变化。

8.2 蛋白质分子中激子的非线性特性

8.2.1 在蛋白质分子中的非线性激发的模型

在乙酰苯胺分子晶体中的激子的非线性激发不能应用于蛋白质分子, 这是因为后者是具有生命自组织特性的生物大分子, 它是由 20 种不同类型的氨基酸分子组成的分子长链。每个氨基酸分子又由碳原子、氢原子、氨基和羧基组成。这些分子长链借助于在肽群 H-N-C=O 之间的肽键和相应的氢键折叠成 α -螺旋型的结构。在这种结构中酰胺键 C=O 的伸缩振动是 ATP 分子水解释放的 0.43 eV 的生物能量的接受者。对此, Davydov 提出了这个生物能量是由 C=O 的伸缩振动产生的量子-激子与氨基酸残基的声学振动量子(声子)相互作用, 使激子自陷为孤子, 从而把 ATP 分子水解产生的能量从一处传递到另一处。这就是在第 6 章介绍的 Davydov 理论。在这

种理论中, 激子的集体激发的状态和系统的 Davydov 哈密顿量分别用式 (6.52) 和式 (6.53) 来表示。这个理论提出后引起了广泛注意, 对它的理论基础及准确性、孤子的热稳定与寿命及其他特性进行了广泛研究。结果表明, Davydov 孤子在生理温度 300 K 时是不稳定的, 其寿命仅为 $10^{-13} \sim 10^{-12}$ s。在这个寿命的时间内此孤子仅能传递过十多个氨基酸残基。于是, 不能承担起传递生物能量的功能, 至此该理论是不成功的。其原因是在式 (6.52) 中的 Davydov 哈密顿量和式 (6.53) 的波函数不是非线性

Schrödinger 方程的真正解。在式 (6.40) 中的 B_n^+ (B_n) 是在 n 位激子的产生 (消灭) 算符, 在式 (6.50) 中的 u_n 和 P_n 是氨基酸残基的位移算符和共轭动量算符。在这种情况下, 有人把式 (6.53) 的 $|D_2\rangle$ 用以下的 $|D_1\rangle$ 波函数代替:

$$|D_1\rangle = \sum_n \left\{ \varphi_n(t) B_n^+ |o\rangle_{\text{ex}} \cdot \exp \left[\sum_q [\alpha_{nq}(t) a_q^+ - \alpha_{nq}^*(t) a_q] \right] \right\} |o\rangle \quad (8.21)$$

这里 $|o\rangle = |o\rangle_{\text{ex}} |o\rangle_{\text{ph}}$, a_q^+ (a_q) 是氨基酸残基的声学振动产生的声子的产生 (消灭) 算符, $\alpha_{nq}(t)$ 和 $\alpha_{nq}^*(t)$ 是一些未知的函数。但这种代替未能改变 Davydov 理论的不足和弱点, 即孤子态在生理温度时仍是不稳定的。至此, 很多人认为多量子态 ($n > 2$) 波函数可能使孤子态是热稳定的。于是 Brown 等人提出相干态波函数, Kerry 和 Lomdahl 等人建议使用 $n > 2$ 的多量子波函数, Föner 和 Cruzeiro-Hansson 等人先后用两量子的单粒子激发态波函数等代替 Davydov 理论中的 $|D_2\rangle$ 。但相干态理论不能保持粒子数守恒, 而多量子理论又与 ATP 水解仅能激发两个量子的实验事实不相符合, 从而被放弃。同时, Hansson 的理论实际已包含 4 个量子, 也与事实不符。Föner 的理论是单粒子激发态, 也有不少困难, 未能得到发展。庞小峰吸取了上述模型的优缺点, 既考虑了在蛋白质分子中产生的激子的集体激发具有像声子那样的相干性, 但又考虑了由 ATP 水解释放的能量仅能激发两个量子的实验事实, 将一个标准相干态在做级数展开式时仅保留其中的前三项。于是, 把整个系统中的声子和激子激发的波函数表示为

$$|\Phi(t)\rangle = |\varphi(t)\rangle |\beta(t)\rangle = \frac{1}{\lambda} \left[1 + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ + \frac{1}{2!} \left(\sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right)^2 \right] |0\rangle_{\text{ex}} \times \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) u_n] \right\} |0\rangle_{\text{ph}} \quad (8.22)$$

这里 u_n 和 P_n 是氨基酸残基的位移和动量算符, 而 $\varphi_n(t)$, $\beta_n(t) = \langle \Phi(t) | u_n | \Phi(t) \rangle$ 和 $\pi_n(t) = \langle \Phi(t) | P_n | \Phi(t) \rangle$ 是三个未知的函数, λ 是归一化常数, 为了方便, 常选择它为 1。

由于每个氨基酸残基都具有的 0.8~3.2 Dabye 的偶极矩, 于是庞小峰把由相邻激

子激发之间的相互作用导致的相邻氨基酸残基之间的相对位移的改变的相互作用 $x_2(u_{n+1} - u_n)(B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1})$ 项加进了原来的 Davydov 哈密顿式 (6.52) 中, 则此系统的哈密顿量现在为

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{ex}} + H_{\text{ph}} + H_{\text{int}} \\ &= \sum_n \left[\varepsilon_0 B_n^+ B_n - J(B_n^+ B_{n+1} + B_n B_{n+1}^+) \right] + \sum_n \left(\frac{P_n^2}{2M} + \frac{1}{2} W(u_n - u_{n-1})^2 \right) + \\ &\quad \sum_n \left[\chi_1(u_{n+1} - u_{n-1}) \right] B_n^+ B_n + \chi_2(u_{n+1} - u_n) (B_{n+1}^+ B_n + B_n^+ B_{n+1}) \end{aligned} \quad (8.23)$$

这里 $\varepsilon_0 = \hbar \omega_0 = 1666 \text{ cm}^{-1}$ 是激子的能量(或 C=O 键的伸缩振动能), 系统的耦合系统

χ_1 和 χ_2 分别表征了氨基酸残基发生单位伸长时所导致的激子的特征振动能量和它们之间相互作用能的变化, J 是在相邻 C=O 键之间的偶极-偶极相互作用能。在式 (8.22) 中激子的集体激发的波函数不再是原来 Davydov 波函数 $|D_2\rangle$ 或 $|D_1\rangle$ 的单粒子激发态, 而是一个相干态, 具体说是一个准相干态。它具有相干的特性, 在 $|\varphi_n(t)| \ll 1$ 时 $|\varphi(t)\rangle$ 可以写成一个标准的相干态, 即

$$\begin{aligned} |\varphi(t)\rangle &= \frac{1}{\lambda'} \left[1 + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ + \frac{1}{2!} \left(\sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right)^2 \right] |0\rangle_{\text{ex}} \approx \frac{1}{\lambda'} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right] \times \\ &\quad \exp \left\{ \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right\} |0\rangle_{\text{ex}} = \frac{1}{\lambda'} \exp \left\{ \sum_n [\varphi_n(t) B_n^+ - \varphi_n^*(t) B_n] \right\} |0\rangle_{\text{ex}} \end{aligned} \quad (8.24)$$

因此, 在 $\lambda' = 1$ 时式 (8.24) 的后式是一个标准相干态, 它是归一化的, 于是此波函数也是归一化的。由于此时 $\varphi_n(t)$ 必须满足 $\sum_n |\varphi_n|^2 = 1$, 对于由几百个氨基酸残基组成的蛋白质分子来讲, 条件 $|\varphi_n(t)| \ll 1$ 是自然成立的。故庞小峰的波函数中的激子波函数式 (8.22) 和声子部分一样, 也具有相干的特性。于是式 (8.22) 的系统波函数就能真实地反映蛋白质分子中的集体激发的相干性, 同时在 $\lambda' = 1$ 时它也是归一化的。但它不是粒子数算符 $\hat{N} = \sum_n B_n^+ B_n$ 的本征态, 因为 $\hat{N}|\varphi(t)\rangle = 2|\varphi(t)\rangle - \left[2 + \sum_n \varphi_n(t) B_n^+ \right] |0\rangle$ 。实际上, 它却真正包含了两个量子(激子), 即

$$\begin{aligned}
N &= \langle \varphi(t) | \hat{N} | \varphi(t) \rangle = \sum_n \langle \varphi(t) | B_n^+ B_n | \varphi(t) \rangle \\
&= \left\{ \sum_n |\varphi_n(t)|^2 + \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \right\} \\
&= \left(\sum_n |\varphi_n(t)|^2 \right) \left(1 + \sum_m |\varphi_m(t)|^2 \right) = 2
\end{aligned} \tag{8.25}$$

式中, $\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1$, $\sum_n |\varphi_n(t)|^2 = 1$, $[B_n, B_m^+] = \delta_{nm}$

因此, 此波函数满足 ATP 水解释放的能量仅能激发两个量子的实验事实, 于是具有好的实验基础。但它不是标准相干态, 故称它为两量子准相干态波函数。上述结果都是系统波函数式(8.22)的特性。因此, 它是与其他所有模型不同的新波函数。

8.2.2 系统中的非线性激发应当用非线性Schrödinger方程描述

从以上系统的波函数和哈密顿量与以下的海森堡方程

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi(t) | u_n | \Phi(t) \rangle &= \langle \Phi(t) | [u_n, H] | \Phi(t) \rangle \\
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \Phi(t) | P_n | \Phi(t) \rangle &= \langle \Phi(t) | [P_n, H] | \Phi(t) \rangle
\end{aligned} \tag{8.26}$$

可得到声子的运动或 $\beta_n(t)$ 的方程为

$$\begin{aligned}
M \ddot{\beta}_n(t) &= W [\beta_{n+1}(t) - 2\beta_n(t) + \beta_{n-1}(t)] + 2\chi_1 [|\varphi_{n+1}(t)|^2 - |\varphi_{n-1}(t)|^2] + \\
&2\chi_2 \{ \varphi_n^*(t) [\varphi_{n+1}(t) - \varphi_{n-1}(t)] + \varphi_n^*(t) [\varphi_{n+1}(t) - \varphi_{n-1}^*(t)] \}
\end{aligned} \tag{8.27}$$

从与时间有关的 Schrödinger 方程, $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi\rangle = \hat{H} |\Phi(t)\rangle$ 和式(8.22) 与式(8.23),

可得到激子的运动或 $\varphi_n(t)$ 的方程为

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi_n(t) &= \varepsilon_0 \varphi_n(t) - J [\varphi_{n+1}(t) + \varphi_{n-1}(t)] + \chi_1 [\beta_{n+1}(t) - \beta_{n-1}(t)] \varphi_n(t) + \\
&\chi_2 [\beta_{n+1}(t) - \beta_n(t)] \times [\varphi_{n+1}(t) + \varphi_{n-1}(t)] + \\
&\frac{5}{2} \left(w(t) - \frac{1}{2} \sum_m [\dot{\beta}_m(t) \pi_m(t) - \dot{\pi}_m(t) \beta(t)] \right) \varphi_n(t)
\end{aligned} \tag{8.28}$$

这里, $w(t) = \langle \beta(t) | H_{ph} | \beta(t) \rangle = \sum_n \left(\frac{1}{2M} \pi_n^2(t) + \frac{1}{2} W [\beta_n(t) - \beta_{n-1}(t)]^2 \right) + \sum_q \frac{1}{2} \hbar \omega_q$

从以上研究可以看出, 在由众多氨基酸残基组成的蛋白质的非线性系统中所产生的激子和声子的运动都是按同一方式处理的。即都实事求是地根据粒子自身运动的特点, 给出了它们的运动方程, 并彼此相互相关, 共同组成了一个非线性的量子力学系统。这种处理方式完全不同于量子力学中对微观粒子运动的处理方式。在后者中往往把氨基酸残基组成的晶格系统冻结化, 并用于一个与粒子状态无关的平均场或周期场作为外势场来研究。这样做完全忽略晶格点自身运动的特点, 显然这是不符合实际的。于是没有一个非线性相互作用去抑制激子的波动特性, 从而激子运动服从线性 **Schrödinger** 方程, 并且仅具有波动性, 如第1章所述。因此, 在用非线性量子力学理论研究多粒子系统时, 所采用的方法是不同于原来量子力学的, 这是应当加以注意的。

在连续性近似下, 庞小峰从式(8.27)~式(8.28)得到

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) = R(t)\varphi(x, t) - Jr_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x, t) - G_p |\varphi(x, t)|^2 \varphi(x, t) \quad (8.29)$$

和

$$\frac{\partial \beta(x, t)}{\partial \xi} = \frac{\partial \beta(x, t)}{\partial x} = -\frac{4(\chi_1 + \chi_2)}{W(1-s^2)r_0} |\varphi(x, t)|^2 \quad (8.30)$$

这里 $R(t) = \dot{\varphi}_0 - 2J + \frac{5}{2} \left[w(t) - \frac{1}{2} \sum_m (\dot{\beta}_m \pi_m - \dot{\pi}_m \beta_m) \right]$ 。

这里 $\xi = x - vt$, $s = v/v_0$ 和 $v_0 = r_0 \sqrt{W/M}$ 是蛋白质分子链的声速。显然, 式(8.29)是一个标准的非线性 **Schrödinger** 方程。如前所述, 此时方程具有孤子解, 其描述的粒子具有波-粒二象性等特性, 而式(8.29)的孤子解可表示成

$$\varphi(x, t) = \left(\frac{\mu_p}{2} \right)^{1/2} \text{sech} \left[\left(\mu_p / r_0 \right) (x - x_0 - vt) \right] \times \exp \left\{ i \left[\frac{\hbar v}{2Jr_0^2} (x - x_0) - E_v \frac{t}{\hbar} \right] \right\} \quad (8.31)$$

$$\mu_p = \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2}{W(1-s^2)J}, \quad G_p = \frac{8(\chi_1 + \chi_2)^2}{W(1-s^2)} \quad (8.32)$$

8.2.3 非线性粒子态的特性

虽然在庞小峰模型下的激子和 **Davydov** 模型的激子都遵守非线性 **Schrödinger** 方程, 但所得的具体方程是有根本区别, 即粒子受到的非线性相互作用是不同的。在庞小峰模型下, 非线性作用能 G_F 远大于 **Davydov** 模型的相应值 G_D 。它们可以表示成

$$G_p = 2G_D \left[1 + 2(\chi_2/\chi_1) + (\chi_2/\chi_1)^2 \right] > G_D \quad (8.33)$$

相应的孤子振幅值 μ_p 可表示成

$$\mu_p = 2\mu_D \left[1 + 2(\chi_2/\chi_1) + (\chi_2/\chi_1)^2 \right] > \mu_D \quad (8.34)$$

但在 Davydov 模型中, 则为

$$G_D = 4x_1^2/W(1-s^2) \quad \text{和} \quad \mu_D = x_1^2/W(1-s^2)J$$

由此可知, 孤子态的局域特性和稳定性大大增加。和 Davydov 比较起来, 其热稳定性也大大增强。事实上, 在庞小峰模型中的孤子能量为

$$E = \langle \Phi(t) | H | \Phi(t) \rangle = \frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{+\infty} 2 \left[Jr_0^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^2 + R |\varphi(x, t)|^2 - G_p |\varphi(x, t)|^4 \right] dx + \\ \frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{2} \left[M \left(\frac{\partial \beta(x, t)}{\partial t} \right)^2 + W r_0 \left(\frac{\partial \beta(x, t)}{\partial t} \right)^2 \right] dx = E_0 + \frac{1}{2} M_{\text{sol}} v^2 \quad (8.35)$$

$$\text{其孤子的静止能量为} \quad E_0 = 2(\dot{q}_0 - 2J) - \frac{8(x_1 + x_2)^4}{3W^2 J} = E_s^0 - w' \quad (8.36)$$

这里 $w' = \left[8(x_1 + x_2)^4 \right] / 3W^2 J$ 是孤子的束缚能。此孤子态的有效质量为

$$M_{\text{sol}} = 2m_{\text{ex}} + \frac{8(x_1 + x_2)^4 (9s^2 + 2 - 3s^4)}{3W^2 J (1-s^2)^3 v_0^2} \quad (8.37)$$

在此种情况下形成的孤子态的结合或束缚能又可表成

$$E_{\text{BP}} = \frac{-8(x_1 + x_2)^4}{3W^2 J} = 8E_{\text{BD}} \left[1 + 4 \left(\frac{x_2}{x_1} \right) + 6 \left(\frac{x_2}{x_1} \right)^2 + 4 \left(\frac{x_2}{x_1} \right)^3 + \left(\frac{x_2}{x_1} \right)^4 \right] \quad (8.38)$$

显然, 在庞小峰模型中由激子形成的孤子态的结合能 E_{BP} 比 Davydov 模型中的 $E_{\text{BD}} = -\chi_1^2 / 3JW^2$ 大许多倍。为了具体理解两类不同孤子的特点, 这里采用了 Young 等人和 Scott 的方法, 引入了一个新参数 σ 。在庞小峰理论中, 其 σ_p 可表示成 $4\pi\sigma_p = (\chi_1 + \chi_2)^2 / 2W\hbar\omega_D$, 这里 $\omega_D = \sqrt{\omega/M}$ 是声学声子的 Debye 频率。研究表明, 若 $4\pi\sigma > 1$ 时, 粒子之间是强耦合相互作用, 在 $4\pi\sigma \ll 1$ 时是弱耦合作用。对于 α 螺旋蛋白质分子, 它的物理参数分别为

$$J = 1.55 \times 10^{-22} \text{ J}; \quad W = (13 - 19.5) \text{ N/m}; \quad M = (1.71 - 1.91) \times 10^{-25} \text{ kg} \\ \chi_1 = 62 \times 10^{-12} \text{ N}; \quad \chi_2 = (10 - 18) \times 10^{-12} \text{ N} \quad (8.39) \\ r_0 = 4.5 \times 10^{-10} \text{ m}; \quad \varepsilon_0 = (0.205 - 0.21) \text{ eV}$$

于是可求得其孤子的 $4\pi\sigma_p = 0.11 \sim 0.273$ 。这意味着庞的模型不是弱耦合模型。但对 Davydov 模型的相应值为 $4\pi\sigma_D = 0.036 \sim 0.045$ ，这意味着 Davydov 模型是弱耦合。使用 Venzel 和 Fischer, Nagy 等人方法，再引入另一个参数 $\gamma = J/2\hbar\omega_D$ 。利用这两个参数 σ_p 和 γ ，则庞理论中的孤子的束缚能量与有效质量可分别表示成

$$E_{BP}/J = 8(4\pi\sigma_p/\gamma)^2/3, \quad M_{\text{sol}} = 2m_{\text{ex}} \left[1 + 32(4\pi\sigma_p)^2/3 \right] \quad (8.40)$$

使用以上数值可求得 $\gamma = 0.08$ ，而 E_{BP}/J 作为 $4\pi\sigma$ 的函数关系在图 8.2 中表示。但对于 Davydov 模型的相应值分别为 $E_{BD}/J = (4\pi\sigma_D/\gamma)^2/3$ ， $M_{\text{sol}} = m_{\text{ex}} \left[1 + 2(4\pi\sigma_D/\gamma)^2/3 \right]$ 。这里， $4\pi\sigma_D = \chi_1^2/2\omega\hbar\omega_D$ ，它们与 $4\pi\sigma$ 的关系示于图 8.2 中。由此看出 E_{BP} 比 E_{BD} 大约大两个数量级。因此，在庞小峰模型中孤子的局域性和稳定性比 Davydov 模型的大大提高，于是更加稳定。

事实上，在庞小峰的模型中，与孤子的稳定性相关的非线性相互作用为 $G_p = 8(\chi_1 + \chi_2)^2/(1-s^2)W = 3.8 \times 10^{-21} \text{ J}$ ，它大于色散能 $J = 1.55 \times 10^{-22} \text{ J}$ ，于是，它不能再被色散。但是，Davydov 孤子的相应非线性作用能为 $G_D = 4\chi_1^2/(1-s^2)W = 1.18 \times 10^{-21} \text{ J}$ 。它为 $\left(1/4 \sim 1/3\right)G_p$ 。在庞小峰模型中的孤子的束缚能在 300 K 时的值为 $E_{BP} = (4.16 - 4.3) \times 10^{-21} \text{ J}$ ，它既大于色散能 J ，也大于在 300 K 时热扰动能 $\frac{5}{2}K_B T = 4.13 \times 10^{-21} \text{ J}$ ，并 4 倍大于 Debye 能 $K_B \Theta = \hbar\omega_D = 1.2 \times 10^{-21} \text{ J}$ 。这意味着这个孤子不易被热扰动而被破坏。于是此时形成的微观粒子的孤子态在 300 K 时是热稳定的。但是对于 Davydov 理论其孤子的能量是 $E_{BD} = 0.188 \times 10^{-22} \text{ J}$ ，它是 23 倍小于庞小峰理论模型的相应值，22 倍小于 $K_B T$ 能量，并小于 $K_B \Theta$ 6 倍。因此，Davydov 孤子寿命短，在 300 K 时是不稳定的。

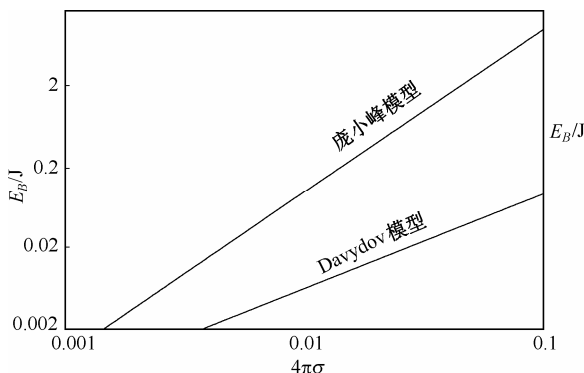


图 8.2 在庞小峰模型和 Davydov 模型中的孤子束缚能 E_B 与偶极-偶极相互作用能 J 的比值随耦合常数 $4\pi\sigma$ 的变化特性

8.2.4 系统中粒子的非线性激发对背景场产生的反效应

从以上研究可知,在蛋白质分子中由 ATP 水解的生物能所激发的激子在和氨基酸分子畸变位移相互作用时产生了非线性相互作用力,靠这个与粒子状态相关的有效势能提供的双阱势能使激子自陷成一个孤子,而以经典粒子的规律运动,从而具有波-粒二象性。但是,这种非线性相互作用不但被激子感受到了,按照物理学中的作用和反作用定理可知,此时声子也同时受到了这个非线性相互作用。这一点是很容易证明的。事实上,在 ACN 中,如果采用式(8.13)和式(8.16)~式(8.17)以及

$$\mu = \frac{(\chi_1 + \chi_2)^2 \hbar^2}{M \nu_0^2 \omega_0^2 (1-s^2) J}$$

能得到肽群或背景场的振动满足方程

$$\frac{\partial}{\partial x} |\varphi(x, t)|^2 = \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^3 \hbar^3}{r_0^3 \beta J^2 (1-s^2) \omega_0^3} \left[u - \frac{4\omega_0^2 (1-s^2)^2 \beta^2}{\hbar^2 (\chi_1 + \chi_2)^2} u^3 \right] \quad (8.41)$$

这里 $s = v/v_0$, 现将式(8.41)代入式(8.13), 可以得到

$$u_{tt} - \nu_0^2 u_{xx} = \frac{4(\chi_1 + \chi_2)^4 \hbar^4}{M r_0^2 \beta J^2 (1-s^2) \omega_0^4} \left[u - \frac{4\omega_0^2 (1-s^2)^2 \beta^2}{\hbar^2 (\chi_1 + \chi_2)^2} u^3 \right] \quad (8.42)$$

这是对于 $u(x, t)$ 的 ϕ^4 非线性场方程, 它有孤子解式(8.17)。在这种情况下, 声子所感受到的非线性相互作用是 $-Au^3$ 。因此, 此时肽群或背景场的振动量子(声子)也是局域的, 它和激子一样也具有波-粒二象性。从上面可看到, 声子这时也感受到了符号相反的非线性相互作用的影响, 它是激子受到的非相互作用的反作用。此作用力使声子也变成了一个孤子。因此在这个模型下, 所有粒子都按照实际运动同等地进行处理, 则两个粒子都受到了非线性作用而被局域, 而变成孤子。从而自己的特性发生了根本性的变化。这是一个新特点。这一特点表明在非线性量子力学中的非线性相互作用也存在作用与反作用的关系, 它使系统中的每类粒子都感受到了非线性作用的影响。但因这种非线性作用与粒子的波函数和性质相关, 因此, 处于非线性系统中的所有粒子所受到的是不同形式和大小的非线性相互作用, 但都能变成具有波-粒双重性的粒子。

在蛋白质分子中的激子在受到氨基酸分子的非线性相互作用后变成孤子态而被局域。其时, 声子也受到非线性相互作用而被局域为一粒子。这可从式(8.30)和式(8.31)得到这个结论。现将式(8.31)代入式(8.30), 可以得到

$$\frac{\partial}{\partial x} |\varphi(x, t)|^2 = \frac{4\sqrt{2}(\chi_1 + \chi_2)^3}{r_0^3 W(1-s^2)} \left[\beta - \frac{2(1-s^2)^2 W^2}{(\chi_1 + \chi_2)^2} \beta^3 \right] \quad (8.43)$$

若在让式(8.27)在连续性近似下求解, 并代入式(8.43), 则可以求得

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \beta(x, t) - \nu_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \beta(x, t) = \frac{16(\chi_1 + \chi_2)^2}{M \nu_0^2 J W (1-s^2)} \left[\beta - \frac{2(1-s^2)^2 W^2}{(\chi_1 + \chi_2)^2} \beta^3 \right] \quad (8.44)$$

此方程仍属于 ϕ^4 场方程。众所周知, 它具有的孤子解为 $\beta(x, t) = \left[4(\chi_1 + \chi_2) / W(1-s^2)r_0 \right] \tanh \left[\mu_p / r_0 (x - x_0 - \nu t) \right]$, 因此, 该声子也是变为一个孤子而被局域, 具有波-粒二象性。从这些研究中可以肯定在非线性作用存在的情况下, 不但激子被非线性作用自陷为一个孤子, 而且声子也受非线性作用而变成一个孤子在时空中运动。因此可以得到, 在非线性系统中具有相互作用的微观粒子都受到了非线性相互作用而改变其特性, 变为具有波-粒二象性的孤子。但是, 很明显这种作用与反作用的关系不完全相同于经典力学中的作用与反作用的关系。

8.3 在生理温度时蛋白质中的激子-孤子态的热稳定性

从以上研究得知, 在蛋白质分子中传递生物能量的载流子是由激子变成的孤子态后由孤子来完成的。因此, 孤子可在生命活动中扮演重要作用。这是因为在非线性质子力学中微观粒子的孤子态具有在传递过程中能保持其能量、动量和速度等不变的特性, 于是能把生物能量和信息无损地传到目的地, 从而可保证人和动物等生命体能正确感受到外界的能量和信息的刺激, 也才能把大脑等的信息和能量正确地传到响应的目的地和组织。以保证正确地感受到环境的刺激, 正确地回应外界作用, 以维持生命体自身的生存。因此, 在生命活动中需要孤子, 孤子能保证生命体的正常生活。但孤子的寿命过短也难以完成这些生命过程。因此, 研究这个孤子在生理温度 300 K 时的寿命大小就成为一个必须解决的关键问题。如果寿命过短, 在未传递过应该传过的分子链时就消失了, 则就不能承担起传递生物能量的功能。为此, 考察此类孤子的寿命至关重要。本节就是用量子微扰法来计算此孤子态的寿命。

8.3.1 非线性系统的正则量子化方案

使用式(8.3), 从式(8.23)可得量子化的哈密顿算符为

$$\hat{H} = \sum_n \left[\dot{0} B_n^+ B_n - J (B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n) \right] + \sum_q \hbar \omega_q \left(a_q^+ a_q + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,n} \left[g_1(q) B_n^+ B_n + g_2(q) (B_n^+ B_{n+1} + B_{n+1}^+ B_n) \right] (a_q + a_{-q}^+) e^{i n r_0 q} \quad (8.45)$$

$$\text{式中, } g_1(q) = 2\chi_1 i \left[\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right]^{1/2} \sin(r_0 q), \quad g_2(q) = \chi_2 \left[\frac{\hbar}{2M\omega_q} \right]^{1/2} (e^{i r_0 q} - 1) \quad (8.46a)$$

此时, 式(8.22)中的声子态的波函数可表示成

$$U_2 = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_n [\beta_n(t) P_n - \pi_n(t) u_n] \right\} = \exp \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \alpha_q(t) a_q^+ - a_q^*(t) a_q \right\} \quad (8.46b)$$

这里的 a_q (a_q^+) 为氨基酸残基的声学振动产生的量子(声子)的产生(消灭)算符。 $\alpha_q(t)$ 和 $\alpha_q^*(t)$ 是 t 的函数。由于我们感兴趣于以初始速度 v 运动的孤子特点, 现在让坐标以速度 v 运动, 则这个孤子在这个坐标中是处于静止的。在这个动态坐标系中的系统哈密顿量 $\hat{H} = \hat{H} - v\hat{P}$, 这里 \hat{P} 是整个系统的动量, 它可以表示成

$$\hat{P} = \sum_q \hbar q (a_q^+ a_q - \tilde{B}_q^+ \tilde{B}_q) \quad (8.47)$$

$$\text{式中, } \tilde{B}_q^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{i q n r_0} B_n^+ \quad (8.48)$$

为了得到一个简单的表示式, 现对式(8.45)做连续性近似, 在其后可表示成

$$\begin{aligned} \tilde{H} = \int_0^L & 2 \left[(\dot{0} - 2J) \varphi^+(x) \varphi(x) + J r_0^2 \frac{\partial \varphi^+}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \frac{i \hbar v}{2} \left(\frac{\partial \varphi^+}{\partial x} \varphi(x) - \varphi^+(x) \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \right] dx + \\ & \sum_q \hbar (\omega_q - qv) a_q^+ a_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q 2 [g_1(q) + 2g_2(q)] (a_{-q}^+ + a_q) \times \\ & \int_0^L e^{i k x} \varphi^+(x) \varphi(x) dx \end{aligned} \quad (8.49)$$

这里的 $\varphi(x)$ 现应视为相应于算符 B_n 的场算符, 让 $L = N r_0^2$, $-\pi < k r_0 < \pi$ 和 $\omega_q = \sqrt{W/M r_0} |q|$, $x = n r_0$ 。因为孤子的激发总是相伴于氨基酸残基自身的畸变与位移, 在运动和静止坐标系中, 声子的产生和消灭算符具有如下关系:

$$b_q = a_q - \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q, \quad b_q^+ = a_q^+ - \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q^* \quad (8.50)$$

这里的 b_q (b_q^+) 恰好就是此时产生的新声子的消灭(产生)算符。在这种变换下, 新声子的真空态应为

$$|\tilde{o}\rangle_{\text{ph}} = \exp\left[\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (\alpha_q(t)a_q^+ - \alpha_q^*(t)a_q)\right] |o\rangle_{\text{ph}} \quad (8.51)$$

它是一个相干态, 即 $b_q |\tilde{o}\rangle_{\text{ph}} = 0$ 。现完成正则变换

$$\varphi(x) = \sum_j A_j C_j(x), \quad \varphi^+(x) = \sum_j A_j^+ C_j^*(x) \quad (8.52)$$

式中, $\int C_1^*(x) C_j(x) dx = \delta_{1j}$, $\sum_j C_j^*(x') C_j(x) = \delta(x - x')$, $\int |C_j(x)|^2 dx = 1$

此时的算符 A_s^+ 和 A_k^+ 分别是束缚态 $C_s(x)$ 和扩展态 $C_k(x)$ 的产生算符, 庞小峰使用式 (8.51) ~ 式 (8.52) 部分对角化了哈密顿量式 (8.49), 它现在为

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & W' + E_s A_s^+ A_s + \sum_k E_k A_k^+ A_k + \sum_q \hbar(\omega_q - qv) b_q^+ b_q + \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hbar(\omega_q - qv) (b_q^+ \alpha_q + b_q \alpha_q^*) (1 - A_s^+ A_s) + \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kk'q} F(k, k', q) (b_{-q}^+ + b_q) A_k^+ A_k - \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kq} \tilde{F}(k, q) (b_{-q}^+ + b_q) (A_s^+ A_{-k} - A_k^+ A_s) \end{aligned} \quad (8.53)$$

其中包含的, $C_s(x) = \left(\frac{\mu_p}{2r_0}\right)^{1/2} \text{sech}(\mu_p x/r_0) \exp[i\hbar x v/2Jr_0^2]$

$$E_s = 2 \left[\dot{\phi}_0 - 2J - \frac{\hbar^2 v^2}{2Jr_0^2} - \mu_p J \right] \quad (8.54a)$$

$$\begin{aligned} C_k(x) = & \frac{\mu_p \tanh(\mu_p x/r_0 - ikr_0)}{\sqrt{Nr_0} [\mu_p - ikr_0]} \exp[ikx + (i\hbar x v/2Jr_0^2)] \\ E_k = & 2 \left[\dot{\phi}_0 - 2J - \frac{\hbar^2 v^2}{2Jr_0^2} - J(kr_0)^2 \right] \end{aligned} \quad (8.54b)$$

式中, $W_1 = \frac{1}{N} \sum_q \hbar(\omega_q - qv) |\alpha_q|^2$; $V(x) = \frac{1}{N} \sum_q [g_1(q) + 2g_2(q)] (\alpha_{-q}^* + \alpha_q) e^{iqx}$ 。

在式 (8.53) 中,

$$\begin{aligned}
F(k, k'q) &= 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \int_0^L dx e^{iqx} C_{k'}^*(x) C_k(x) \\
&\approx 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \left\{ 1 - \frac{i\mu_p q r_0}{[\mu_p + i(k+q)r_0][\mu_p - ikr_0]} \right\} \\
&\approx F[k, (k+q), q] \delta_{k'k+q}
\end{aligned} \tag{8.55a}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{F}(k, q) &= 2[g_1(q) + 2g_2(q)] \int_0^L dx e^{iqx} C_{k'}^*(x) C_s(x) \\
&= \frac{2\pi}{\sqrt{2\mu_p}} [g_1(q) + 2g_2(q)] \left\{ 1 - \frac{iqr_0}{\mu_p + ikr_0} \right\} \text{sech}[\pi(k-q)r_0/2\mu_p]
\end{aligned} \tag{8.55b}$$

这里的 α_q 是由条件 $(\omega_q - vq)\alpha_q = (\omega_q + qv)\alpha_q^*$ 来决定的，以此来决定在式 (8.53) 中的 \hat{H} 中的 $(1 - A_q A_s)$ 。于是能得到

$$\alpha_q(t) = \frac{i\pi(\chi_1 + \chi_2)}{W\mu_p(1 - v^2/v_0^2)} \left[\frac{M}{2\hbar\omega_q} \right]^{1/2} (\omega_q + qv) \text{csch}(\pi q r_0 / 2\mu_p) e^{iqvt} = \alpha_q e^{iqvt} \tag{8.56}$$

式中, $W_1 = \frac{2}{3} \mu_p^2 J$, $V(x) = -2J \mu_p^2 \text{sech}^2(\mu_p x / r_0)$ 。

对于式 (8.56) 中的 α_q , 在式 (8.51) 中的 $|\tilde{o}\rangle_{\text{ph}}$ 是一个相干声子态。但不同于在式 (8.55) 中的 $C_k(x)$ (一个非束缚态), 在式 (8.55) 中这个束缚态 $C_s(x)$ 是能与分子畸变相自洽的。分子内部激发的自洽态和分子链的畸变的相互作用形成了一个孤子, 它在原参数系统中是稳定的。在式 (8.49) 中的哈密顿算符 \tilde{H} 相对于粒子的孤子态 $|\tilde{\phi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2!}} (A_s^+)^2 |o\rangle_{\text{ex}} |\tilde{o}\rangle_{\text{ph}}$ 的平均能量为

$$\langle \tilde{\phi} | \tilde{H} | \tilde{\phi} \rangle = 2 \left(\varepsilon_0 - 2J - \frac{\hbar^2 v^2}{4Jr_0^2} \right) - \frac{4}{3} J \mu_p^2 \tag{8.57}$$

显然, 在这个孤子态 $|\tilde{\phi}\rangle$ 中孤子的 \tilde{H} 平均能量应当是等于上面给出的孤子能量 E_{sol} 或者说等于在式 (8.54) 中束缚态的能量 E_s 和声子畸变能 W_1 的总和, 即 $|\psi\rangle \hat{H} |\psi\rangle = E_{\text{sol}} = E_s + W_1$ 。这是一个令人感兴趣的结果, 它表明由上述机理形成的准相干激子-孤子是两量子(激子)的自陷态。但是 $|\tilde{\phi}\rangle$ 不是 \hat{H} 的本征态, 这是由于在 \hat{H} 中存在 $A_k^+ A_s$ 和 $A_s^+ A_{-k}$ 等项的缘故。但因我们仅关心孤子的衰减和寿命, 按 Cottingham 等人的建议可以把式 (8.53) 中的 \hat{H} 分为 $H_0 + V$, 而 $V = V_1 + V_2$, 其中

$$H_0 = W_1 + E_s A_s^+ A_s + \sum_k E_k A_k^+ A_k + \sum_q \hbar(\omega_q - \nu q) b_q^+ b_q + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \hbar(\omega_q - \nu q) (\alpha_q b_q^+ + \alpha_q^* b_q) (1 - A_s^+ A_s) \quad (8.58)$$

$$V_1 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kk'q} F(k, k+q, q) (b_{-q}^+ + b_q) A_{k'}^+ A_k \quad (8.59)$$

$$V_2 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{kq} \tilde{F}(k, q) (b_{-q}^+ + b_q) (A_s^+ A_k - A_s^+ A_{-k}) \quad (8.60)$$

这里的 H_0 描述了在蛋白质中相关准粒子-激子的激发, 即激子-孤子和畸变晶格相关的声子运动。要移去这种激发, 使畸变的晶格变成均匀的, 则必须增加 $4J\mu_p^2/3$ 的能量。因此 $4J\mu_p^2/3$ 便是孤子的束缚能, 或者说是激子与孤子之间的能隙。所以, 在这种情况下孤子是稳定的。

8.3.2 在生理温度时非线性粒子的寿命计算及其随温度变化的特点

按照 Schweitzer 等人的方法, 用量子微扰理论可计算出由式 (8.60) 中的微扰势 V_2 引起的孤子的衰减速率。此时, 应当首先得求出包含有 n 个量子的孤子的衰减速率, 然后再将它退化为具有两个量子的庞小峰模型中孤子态的衰减速率。在这种情况下, 应把仅包含这三项的式 (8.22) 用包含有 $(n+1)$ 项的标准相干态的式 (8.24) 代替。于是, 应当首先在有 n 个激发的子空间中计算出此激子的孤子态寿命。

对于以上的哈密顿算符, H_0 的基态现设为 $|n\rangle$, 它包含有 n 个量子, 而 $\left\langle n \left| \sum_n B_n^+ B_n \right| n \right\rangle = \left\langle n \left| \left(A_s^+ A_s + \sum_k A_k^+ A_k \right) \right| n \right\rangle = n$ 。它具有的能量 $W_1 + nE'_s$, 在这个子空间中其本征态可表示为

$$|n-m, k_1, k_2 \cdots k_m, \{n_q\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n-m)!}} (A_s^+)^{n-m} A_{k_1}^+ A_{k_2}^+ \cdots A_{k_m}^+ |o\rangle_{\text{ex}} \prod_q \frac{(d_q^+)^{n_q}}{\sqrt{n_q!}} |\tilde{o}\rangle_{\text{ph}}^{n-m}$$

这里 $d_q = b_q + \frac{m}{n} \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q = a_q - \frac{n-m}{n} \frac{1}{\sqrt{N}} \alpha_q$, n 和 m ($m \leq n$) 是一些整数, $d_q |\tilde{o}\rangle_{\text{ph}}^{n-m} = 0$,

则相应的系统的能量为

$$E_{n-m; k_1 \cdots k_m, \{n_q\}}^{(0)} = (1 - (m/n)^2) W_1 + (n-m) E'_s + \sum_{j=1}^m E'_{k_j} + \sum_q \hbar(\omega_q - \nu q) n_q$$

这里 E'_s 是具有一个量子(激子)束缚态的能量, E'_k 是一个具有非束缚(去局域)态的能量。在 $m=0$ 时, 这个激发态是 n 型孤子态加相应的畸变晶格对应的声子态的复合态。当 $m=n$ 时, 此时激发态是去局域态, 其中声子相应于未畸变的晶格。除去小的 k 值外, 去局域态就是激子态。因此, 孤子在微扰 V_2 的影响下的衰变就相当于从具有能量

为 $E_s \{n_q\} = W_1 + nE'_s + \sum_q \hbar(\omega_q - \nu q)n_q$ 的 n 个量子的 n 型孤子加声子初始态

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \prod_q \frac{(b_q^+)^{n_q}}{(n_q!)^{1/2}} (A_s^+)^n |o\rangle_{\text{ex}} |\tilde{o}\rangle_{\text{ph}} \quad (8.61)$$

向具有能量为 $E_k \{n_q\} = nE'_k + \sum_q \hbar(\omega_q - \nu q)n_q$ 的去局域激子加未畸变晶格的声子组成的未态

$$|\alpha_k\rangle = \prod_q \frac{(a_q^+)^{n_q}}{(n_q!)^{1/2}} (A_k^+)^n |o\rangle_{\text{ex}} |o\rangle_{\text{ph}} \quad (8.62)$$

的跃迁。在 $V = V_1 + V_2$ 中的 V_2 作用下时, 其初态的声子分布是被认为它处在热平衡态中。应用最低阶微扰理论可将这种跃迁的概率写成

$$\begin{aligned} \bar{W} = & \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t dt' \int_0^t dt'' \left\{ \sum_{\alpha k'} \sum_l P_l^{(\text{ph})} \left\langle n \left| \exp\left(\frac{iH_0 t''}{\hbar}\right) V_2 \exp\left(\frac{-iH_0 t''}{\hbar}\right) \right| \alpha k' \right\rangle \times \right. \\ & \left. \left\langle \alpha k' \left| \exp\left(\frac{iH_0 t'}{\hbar}\right) V_2 \exp\left(\frac{-iH_0 t'}{\hbar}\right) \right| n \right\rangle \right\} \end{aligned} \quad (8.63)$$

使用一阶量子微扰理论, 可计算出由 V_2 引起的孤子的上述跃迁的概率。此时, 由式(8.55)定义的系数 $\tilde{F}(k, q)$ 是正比于对局域态和一个去局域态的乘积的积分, 其大小为 $1/\sqrt{N}$ 的数量级。在 $V = V_1 + V_2$ 中的 V_1 刚好表示了去局域的激子和声子的相互作用, 在弱耦合极限 $J\mu_P/K_B T_0 \ll 1$ (T_0 是在后面示出的) 下, 它的主要作用是修正去局域态的能谱, 从而导致激子和声子的能量的移动, 以影响孤子的状态。一般来讲, 这种效应较弱, 因此在这里不考虑它的影响。

应指出在式(8.63)中对 l 的求和仅表示相对于具有分布概率为 P_l^{ph} 的畸变晶格的声子初始占据数的求和, 这个 P_l^{ph} 表示对于在给定温度 T 时的声子的平衡分布。使用式(8.58)和式(8.60), 可得到

$$\begin{aligned}
\bar{W} = & \frac{1}{\hbar^2} \frac{\pi^2}{2n\mu_1 N^2} \sum_k \sum_{k'} \sum_{k''} \left[g_1^*(k) + 2g_2^*(k) \right] \left[g_1(k'') + 2g_2(k'') \right] \times \\
& \frac{(kr_0)(k''r_0)}{(n\mu_1)^2 + (k'r_0)^2} \operatorname{sech} \left[\frac{\pi r_0}{2n\mu_1} (k - k') \right] \operatorname{sech} \left[\frac{\pi r_0}{2n\mu_1} (k'' - k') \right] \times \\
& \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' \left\{ \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \left(n \left(n^2 - \frac{2}{3} n \right) \mu_1^2 J + nJ (k'r_0)^2 \right) (t' - t'') \right] \right\} \times \\
& << \exp \left(i \left[\sum_q (\omega_q - qv) b_q^+ b_q (t' - t'') \right] (b_k^+ + b_{-k}) \right) \times \\
& \exp \left[i \sum_q (\omega_q - qv) a_q^+ a_q (t' - t'') \right] (b_{-k''}^+ + b_{k''}) >> \left\{
\end{aligned}$$

其中,

$$\begin{aligned}
g_1(k) + 2g_2(k) &= 2\chi_1 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right)^{1/2} \left[A(\cos(r_0 k) - 1) + i(A+1)\sin(r_0 k) \right] \\
&\approx 2i(A+1)(r_0 k) \chi_1 \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right)^{1/2} \\
\mu_1 &= \frac{\chi_1^2 (1+A^2)}{\omega(1-s^2)J}, \quad A = \chi_2/\chi_1
\end{aligned}$$

在上式中的 $\square \cdots \square$ 表示了对其中的函数求统计平均值。这里 A 表示了在新模型中的非线性相互作用项对 Davydov 模型的相应值的比值。为了计算孤子的寿命, 仅对在单位时间内的跃迁概率的长时间行为感兴趣。通过直接的计算, 对于这个平均跃迁概率或衰变速率, 庞小峰得到

$$\begin{aligned}
\Gamma_n = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d\bar{W}}{dt} &= \frac{2}{n\mu_1 \hbar^2} \frac{\pi^2}{N^2} \times \\
&\sum_{kk'} \left[|g_1(k) + 2g_2(k)|^2 \frac{(r_0 k)^2 \operatorname{sech}^2 [\pi(k - k')r_0/2n\mu_1]}{(n\mu_1)^2 + (k'r_0)^2} \right] \times \\
&\operatorname{Re} \int_0^{+\infty} \exp \left\{ -i \left[nJ(k'r_0)^2 + n \left(n^2 - \frac{2}{3} n \right) \mu_1^2 Jt / \hbar + R_n(t) + \xi_n(t) \right] \right\} \times \\
&\frac{\exp[i(\omega_k - kv)t]}{\exp[\beta \hbar(\omega_k - kv)] - 1} dt \quad (8.64)
\end{aligned}$$

此时,

$$R_n(t) = -\frac{1}{n^2 N} \sum_k |\alpha_k|^2 \{i - \exp[-i(\omega_k - kv)t]\}$$

$$\xi_n(t) = -\frac{4}{n^2 N} \sum_k \frac{|\alpha_k|^2 \sin^2 \left[\frac{1}{2}(\omega_k - kv)t \right]}{\exp[\beta \hbar(\omega_k - kv)] - 1}$$

这里 $\beta = 1/K_B T$ 。这就是包含 n 个量子的孤子态在一个给定温度时从初始态跃迁到未态的跃迁概率的表示式。从式(8.64)可知, 式中的 $\Gamma_n, R_n(t), \xi(t)$ 和 $\mu = n\mu_1$ 都随量子数 n 的增加而变化。很明显, 可从它推出在庞小峰模型(此时 $n = 2$)下所形成孤子的跃迁概率和衰变速率。

现在首先给出 $R_2(t)$ 和 $\xi_2(t)$ 的显式。在 $v \rightarrow 0$ 和 $\omega_q \rightarrow \sqrt{W/M}$ 的条件下, 利用 Digamma 函数, 在 $t \rightarrow \infty$ 的长时间下, 可将它们表示为

$$R_2(t) = -R_0 \left[\ln \left(\frac{1}{2} \omega_\alpha t \right) + 1.578 + \frac{1}{2} i\pi \right], \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \xi_2(t) = -\eta t, \quad \eta = \pi R_0 / \beta \hbar = \pi R_0 k_B T / \hbar$$

$$R_0 = \frac{4(\chi_1 + \chi_2)^2}{\pi \hbar W} (M/W)^{1/2} = \frac{2J\mu_p r_0}{\pi \hbar v_0}, \quad \omega_\alpha = \frac{2\mu_p}{\pi} \left(\frac{W}{M} \right)^{1/2}, \quad T_0 = \hbar \omega_\alpha / K_B$$

在计算中使用了 $\coth(\omega_\alpha t/2) \approx 1$ 的条件。

对于给定的蛋白质分子, 这里有 $R_0 < 1$, $T_0 < T$ 和 $R_0 T / T_0 < 1$ 的关系。在这种情况下, 庞小峰模型中的两量子的孤子态的衰变速率为

$$\Gamma_2 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d\bar{W}}{dt}$$

$$= \frac{2}{\mu_p} \frac{\pi^2}{N^2} \sum_{kk'} \frac{(kr_0)^2 |g_1(k) + 2g_2(k)|^2 \operatorname{sech}^2 \left[\left(\pi r_0 / 2\mu_p \right) (k - k') \right]}{\left[\mu_p^2 + (k'r_0)^2 \right] \left[\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1 \right]} (2.43 \omega_\alpha)^{-R_0} \times$$

$$\left\{ \frac{\left(\eta^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k \right]^2 \right)^{(1+R_0)/2}}{\hbar^2 \eta^2 + \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k \right]^2} \right\} \times$$

$$\left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{R_0 \pi}{2} + (1 - R_0) \left[\frac{\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k}{\hbar \eta} \right] \right]^2 \right\} \quad (8.65)$$

它是明显不同于由 Cottingham 等人求出的包含一个量子的 Davydov 孤子的衰减速率:

$$\Gamma_D = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\chi_1^2}{\mu_D} \left(\frac{2\pi}{N} \right) \sum_{kk'} \left(\frac{\hbar}{2M\omega_k} \right) \frac{(kr_0)^2 \sin^2(kr_0) \operatorname{sech}^2[(\pi r_0/2\mu_D)(k-k')]}{[\mu_D^2 + (k'r_0)^2] [\exp(\beta \hbar \omega_k) - 1]} \left(\frac{\omega_\alpha^D}{\eta_D} \right)^{-R_0^D} \times \frac{\hbar^2 \eta_D}{\hbar^2 \eta_D^2 + [J\mu_D^2/3 + J(k'r_0)^2 - \hbar \omega_k]} \quad (8.66)$$

这里 $\eta_D = \pi R_0^D K_B T / \hbar$, $R_0^D = \frac{2\chi_1^2}{\pi \hbar W} \left(\frac{M}{W} \right)^{1/2}$, $\omega_\alpha^D = \frac{2\mu_D}{\pi} \left(\frac{M}{W} \right)^{1/2}$ 。若相比较,可发现在式 (8.65) 中增加了一个附加的因子

$$\left\{ 1 - \frac{1}{2} \left[\frac{R_0 \pi}{2} + (1 - R_0) \left[\left(\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k / \hbar \eta \right) \right] \right]^2 \right\}$$

并且式 (8.66) 中的因子 $\left(\frac{\omega_\alpha}{\eta_D} \right)^{-R_0^D}$, η_D 是用在式 (8.65) 中的

$$(2.43\omega_\alpha)^{-R_0} \cdot \left(\eta^2 + \frac{1}{\hbar^2} \left[\frac{4}{3} \mu_p^2 J + 2(k'r_0)^2 J - \hbar \omega_k \right]^2 \right)^{(1+R_0)/2}$$

所代替。不同于 Davydov 模型, 在庞小峰模型中的 η , R_0 和 T_0 不再是一个小数。使用上面给出的蛋白质分子的参数值, 可求出在 300 K 时的 $\eta_p = 6.257 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $R_0 = 0.629$, $T_0 = 294 \text{ K}$ 。但在 Davydov 模型中, $\eta_D = 2.006 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $R_0 = 0.16$, $T_0 = 95 \text{ K}$ 。因此, 它们都大大小于庞模型中的相应值。于是孤子的寿命也会迥然不同, 这是由于庞模型中的 G_p 和 μ_p 大于 Davydov 模型的相应值 3 倍造成的。使用前面给出的可广泛接受的 α 螺旋蛋白质分子的参数值式 (8.39), 可求出孤子在生理温度 300 K 时的寿命 $\tau = 1/\Gamma_2$ 。当波矢处于第一布里渊区和 $\nu = 0.2\nu_0$ 时, 能求出庞模型的 Γ_2 的值是 $1.54 \times 10^{10} \sim 1.80 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$ 。于是孤子的寿命 τ_2 为 $0.53 \times 10^{-10} \sim 0.65 \times 10^{-10} \text{ s}$, 或者 $\tau/\tau_0 = 510 \sim 600$, 这里 $\tau_0 = r_0/\nu_0$ 是以声速 ν_0 传播的孤子在传播过 1 个晶格空间时所用的时间, 即 $\tau_0 = \sqrt{M/W}$ 。但在 Davydov 理论中, $\tau/\tau_0 < 10$ 。这表明 Davydov 孤子在以声速传递时, 也只能传递过不足 10 个氨基酸残基。由于一般

蛋白质是由 100 到几百个氨基酸分子组成的，一般认为具有 $\tau/\tau_0 > 500$ 的载流子是具有生物学意义的标准，即能充当传递生物能量的任务。因此，Davydov 孤子是无生物学意义的。但庞模型中的孤子在生理温度时可传递过 600 多个氨基酸分子，即它有一个较长的寿命，因此具有重要的生物功能。从而可判定庞模型是适合于蛋白质分子的。

但是，上述孤子的寿命与温度有关。显然，当温度升高时，由于热的无序扰动的增加，也增加了孤子向去局域的裸激子态的跃迁，从而使它的寿命减少。在图 8.3 中给出了庞模型中的孤子寿命 τ/τ_0 随温度的改变。从图中看到，此孤子的寿命随温度的上升以近指数的衰减。但在 310 K 的高温时，这孤子仍有足够长的寿命。因此，这新孤子可称得上是生物能量的真正载流子。为了和 Davydov 模型比较，在图 8.4 中示出了庞模型和 Davydov 模型下孤子的寿命的对数 $\ln(\tau/\tau_0)$ 随温度的变化。从图 8.4 中可见，庞模型中的孤子的寿命高于 Davydov 孤子寿命近两个数量级，因此庞模型真正优于 Davydov 模型。

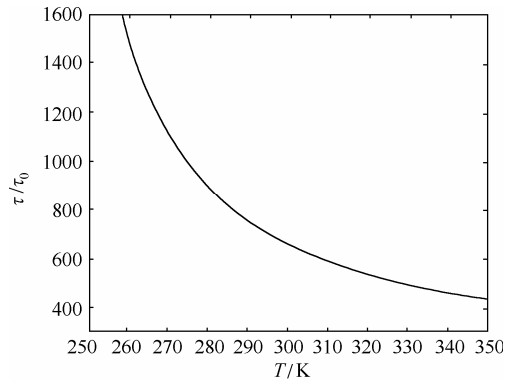


图 8.3 在庞模型和 α 螺旋蛋白质分子中的孤子相对寿命 τ/τ_0 随温度的变化

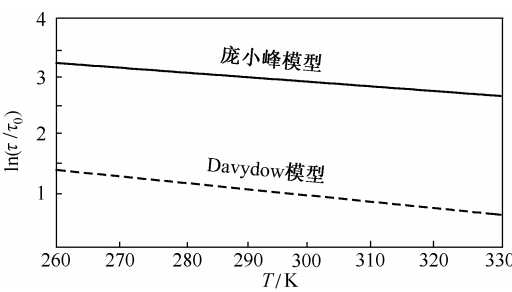


图 8.4 在庞模型和 Davydov 模型中孤子态的相对寿命 τ/τ_0 的对数值随温度的变化

8.4 结构的无序和介质的温度及阻尼特性对激子的非线性激发运动的影响

8.4.1 数值模拟的基本方法

在以上的理论研究中,是把蛋白质分子看成由大小一样的氨基酸分子构成的均匀、周期性的结构,这与实际情况不符。实际上,蛋白质是由分子质量在 $75 m_p$ (谷氨酸)到 $204 m_p$ (色氨酸) (m_p 是质子的质量) 范围内,其分子权重在 $0.67 \bar{M} \sim 1.8 \bar{M}$ [$\bar{M} = 114 m_p = (1.07 \sim 1.91) \times 10^{25} \text{ kg}$] 之间的 20 种不同氨基酸分子组成的非周期性和非均匀的结构。同时,每个蛋白质分子还有不等的侧基和杂质相连。这些都造成了蛋白质分子的结构无序。于是,它必然引起蛋白质分子的上述动力学方程中的质量 M 、耦合系数 χ_1 和 χ_2 、劲度系数 W 、偶极-偶极相互作用能 J 及基态能量 $\dot{q}_0 = \hbar \omega_0$ 等基本

参数值的改变,从而影响由激子形成的孤子态的运动。另外,在上述理论计算中常采用一些连续近似和长波长近似等方法。这些近似法的使用影响激子的孤子态激发的真实性。因此,研究在这些非均匀和非周期情况下蛋白质分子中所形成的孤子是否真实存在和稳定性显得非常必要。因此,很有必要详细考察在结构无序和介质温度与阻尼特性影响下的激子的孤子态的状况,确定它是否是稳定的。只有通过这些研究,才能最终确定此孤子态是否真是蛋白质分子中的生物能量传递的载流子。同时,在计算中要尽量避免采用各种近似方法,使计算结果可信和真实。于是不得不采用数值模拟方法。庞小峰等采用了 Runge-Kutta 方法对分立的运动方程组即式(8.27)和式(8.28)进行数值计算。此时,若对式(8.28)做 $a(t) \rightarrow a_n(t) \exp[i\varepsilon_0 t/\hbar]$ 的变换,则可消去其中的 $\dot{q}_0 a_n(t)$ 项。在这里我们用 $a_n(t)$ 和 $q_n(t)$ 分别代替了在式(8.28)中的 $\varphi_n(t)$ 和 $\beta_n(t)$; 而 $a_n(t)$ 是一复数,常把它分解为虚部和实部,即 $a_n(t) = a(t)r_n + ia(t)i_n$ 。则关于

$a_n(t)$ 和 $q_n(t)$ 的运动方程式(8.27)和式(8.28)现在变为

$$\hbar \dot{a}_n = -J(ai_{n+1} + ai_{n-1}) + \chi_1(q_{n+1} - q_{n-1})ai_n + \chi_2(q_{n+1} - q_n)(ai_{n+1} + ai_{n-1}) \quad (8.67)$$

$$-\hbar \dot{i}_n = -J(ar_{n+1} + ar_{n-1}) + \chi_1(q_{n+1} - q_{n-1})ar_n + \chi_2(q_{n+1} - q_n)(ar_{n+1} + ar_{n-1}) \quad (8.68)$$

$$\dot{q}_n = \frac{y_n}{M} \quad (8.69)$$

$$\dot{y}_n = W(q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) + 2\chi_1(ar_{n+1}^2 + ai_{n+1}^2 - ar_{n-1}^2 - ai_{n-1}^2) + 4\chi_2[ar_n(ar_{n+1} - ar_{n-1}) + ai_n(ai_{n+1} - ai_{n-1})] \quad (8.70)$$

这里 $|a_n|^2 = |ar_n|^2 + |ai_n|^2$ 和 $q_n = \beta_n$ 。方程式 (8.67) ~ 式 (8.70) 就是决定 $a_n(t)$ 或孤子状态的动力学方程。如果蛋白质分子是由 N 个氨基酸残基组成的，则现在就应当求解 $4N$ 个方程组。当使用 4 阶 Runge-Kutta 方法求这些方程的数值解时，常用 j 表示时间的分立度，用 h 表示空间分立度，即步长。在计算中还必须要求整个能量 $E = \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle$ 守恒到 0.0012 eV 的程度，能量是实数，其虚部值应低于 0.001 eV 或等于 0，其模数也是守恒到 0.3×10^{-24} 等。在计算中所使用的初始值选为 $a_n(t=0) = A \operatorname{sech} \left[(n-n_0)(\chi_1 + \chi_2)^2 / 4JW \right]$ ，这里 A 是归一化常数，其晶格的初始值为 $q_n(t=0) = \pi_n(t=0) = 0$ ，其时间步长 0.0195 ps，能量单位为 eV，空间距离选为 Å (1 Å = 0.1 nm)，时间为 ps。 N 是固定为 50 或 100。采用 MATLAB 软件和数值平行方法进行运算。

8.4.2 系统的结构无序对孤子态的影响

庞小峰使用前两节给出的 α 螺旋蛋白质分子的平均参数值式 (8.39)，并利用式 (8.67) ~ 式 (8.70) 的方程组来计算。在周期均匀性的蛋白质分子中，从方程组式 (8.67) ~ 式 (8.70) 求出的数值解的结果在图 8.5 中显示。此图表明解的绝对值的平方 $|a_n(t)|^2$ 的值在时间和空间变化时始终能保持其振幅和能量不变的向前传播，因此它是一个孤子解。如果把上述两个初始状态信号放在分子链的两端，让它们在空间某地相碰撞，其碰撞的特征与图 5.3 非常相似。可见两列孤波在碰撞中仍能保持振幅不变地向前传播，很类似于经典物理中的两个粒子的碰撞特征。因此，这些结果证明了非线性粒子具有经典粒子的特征。从这些结果又使我们坚信由非线性 Schrödinger 方程描述的微观粒子具有粒子和波动的双重特性。

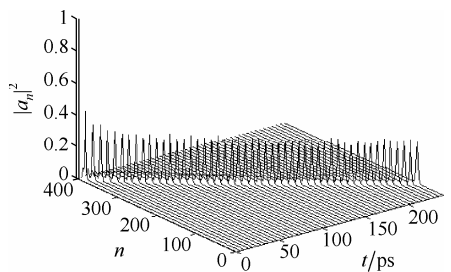


图 8.5 在均匀分子链中的孤立波解

但是在上述数值计算中未考虑结构无序的影响，现在将它们加入到计算中。在由 $N = 50$ 个氨基酸组成的结构无序的系统中，空间格点上可能存在质量不同的氨基酸残基，例如，在 $n = 40$ 位上的残基的质量突然具有 $M_{40} = 100\bar{M}$ ，乃至 $M_{40} = 100\,000\bar{M}$ 时，这里 $\bar{M} = 114 m_p$ ，用上述方法进行数值模拟。此种情况下由数值模拟得出的孤

子的传播示于图8.6中。可见，此时所生成的孤子仍能保持振幅和形状不变地向前传播。这表明在蛋白质中生成的孤子态具有在这类质量无序时仍能保持其振幅不变的特性。故该孤子态能坚强地抵制这种结构无序的影响。

但是，在质量序列的无序是连续时，就必须引入一个无规产生子 α 去表征这种无序，即此种情况的无序可表示为 $M_k = \alpha_k \bar{M}$ ，这里 α_k 表示在一个确定的间隔内，以相同的几率，无规则地出现的质量变化。对于 $0.67 \leq \alpha_k \leq 400$ 和 $0.67 \leq \alpha_k \leq 700$ 时的质量无序变化的情况下，蛋白质中生成的孤子态示于图8.7中。可见在 $0.67 \leq \alpha_k \leq 700$ 的

无序状态下, 孤子态出现色散, 呈现不稳定性, 但在 $0.67 \leq \alpha_k \leq 400$ 的情况下是稳定的。
可见在较小的质量无序时孤子态是稳定的, 但在很大质量无序时它开始色散。

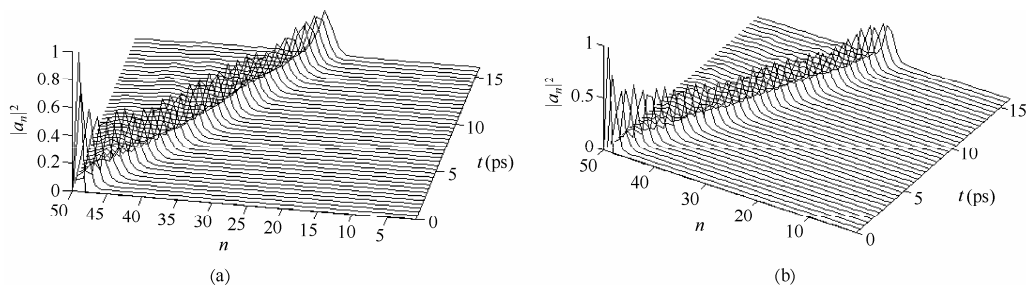


图 8.6 在 (a) $M_{40} = 100\bar{M}$ 和 (b) $M_{40} = 100\,000\bar{M}$ 时孤子态的状态

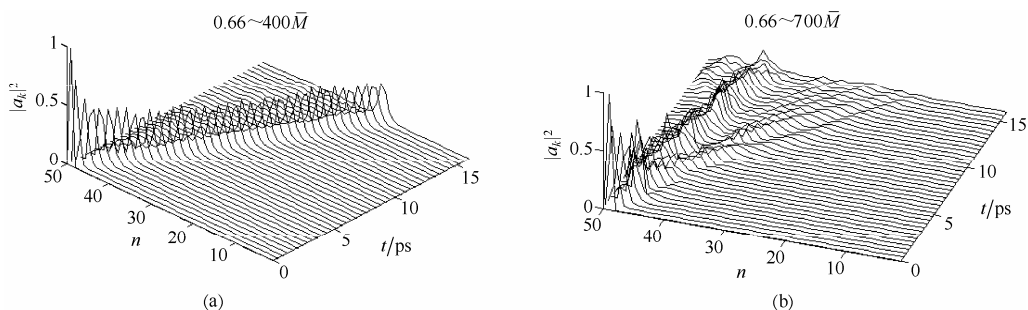


图 8.7 在 (a) $0.67 \leq \alpha_k \leq 400$ 和 (b) $0.67 \leq \alpha_k \leq 700$ 时孤子态的行为

如果结构无序引起分子链的弹性(劲度)系数 W 发生变化, 它也可能使孤子态的性质发生变化。在图8.8中示出了在 W 的涨落为 $\Delta W = W - \bar{W} = \pm 45\%\bar{W}$ 和 $75\%\bar{W}$ 时, 生成的孤子态的情况。可见, 这一孤子态在 $\Delta W = \pm 45\%\bar{W}$ 的无序影响下是稳定的, 但在 $\Delta W = \pm 75\%\bar{W}$ 的大涨落影响下, 它开始色散而处于不稳定状态之中。

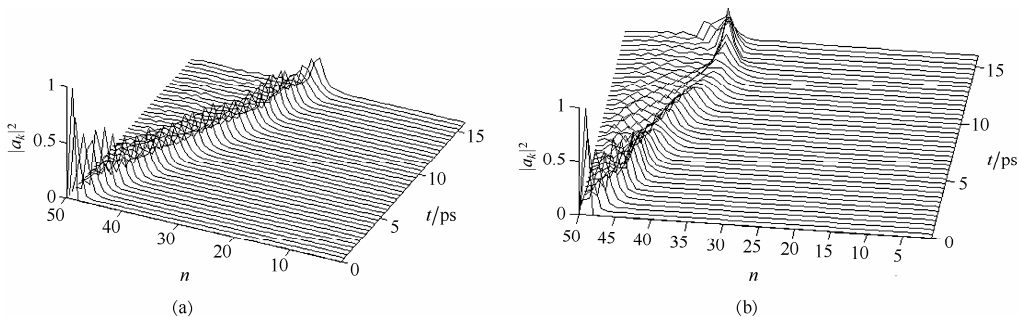
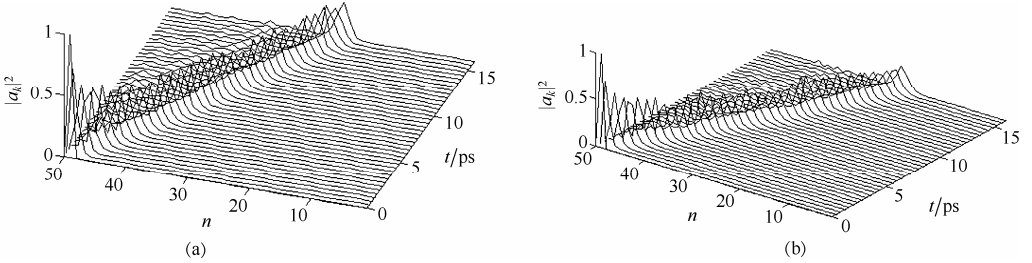
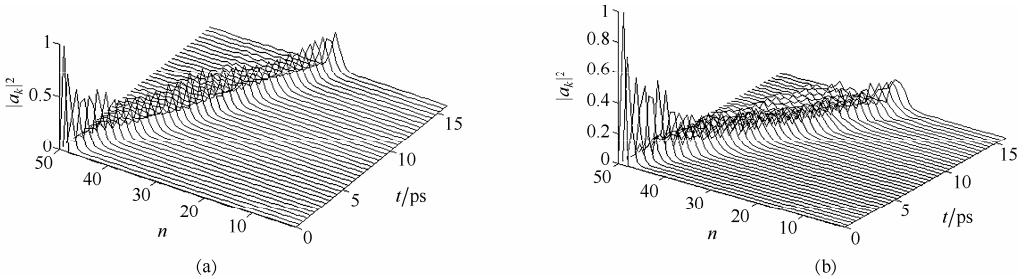


图 8.8 (a) $\Delta W = \pm 45\% \bar{W}$ 和 (b) $\Delta W = \pm 75\% \bar{W}$ 时孤子态的行为

但是偶极-偶极相互作用能较灵敏地改变孤子的特性。在图8.9中示出了这种相互作用分别变化 $\Delta J = J - \bar{J} = \pm 9\% \bar{J}$ 和 $\pm 15\% \bar{J}$ 时的孤子态的性质变化。可见，在 $\Delta J = \pm 9\% \bar{J}$ 时它是稳定的，但在 $\Delta J = \pm 15\% \bar{J}$ 时被色散。

图 8.9 偶极-偶极作用变化 (a) $\Delta J = \pm 9\% \bar{J}$ 和 (b) $\Delta J = \pm 15\% \bar{J}$ 时的孤子态的变化

但对耦合常数 $(\chi_1 + \chi_2)$ 的变化产生的效应要迟钝得多。在图 8.10 中示出了它的涨落变化为 $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = (\chi_1 + \chi_2) - (\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2) = \pm 25\% (\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$ 时孤子态的特性。可见在这种无序性的影响下孤子态未改变其状态。因此，孤子态对这类结构无序有强烈的抵制作用。在图 8.10 中还示出了质量无序为 $0.67 \leq \alpha_k \leq 2$ 和 $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = \pm 25\% (\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$ 时，该孤子态仍能保持自己的特性。可见，该孤子能够压制这种结构涨落造成的影响。

图 8.10 (a) 在 $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = \pm 25\% (\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$ 和 (b) $0.67 \bar{M} \leq M \leq 2 \bar{M}$ 以及 $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = \pm 25\% (\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$ 扰动下的孤子态的特性

一般来讲，这种孤子状态对于杂质侵入和侧链的增加所引起的基态能量 ϵ_0 的变化非常灵敏。如果这个杂质在 n 位，则引起的基态能量的变化用 $\Delta \epsilon_0 = -\epsilon_0 = \delta_n$ 来表示。当 $\epsilon_0 < 1 \text{ meV}$ 时的结果示出于图 8.11 (a) 中。可见，此时孤子态仍是稳定的。

但是,当这种无序是处在连续变化时,就要引入一个无规产生子 $\beta_n(t)$ 去表征基态能量的改变。此时,基态能量的变化可表示成 $\Delta\varepsilon_0 = |\beta_n|$ 。当 $\dot{\varepsilon} < 1 \text{ meV}$, 而 $|\beta_n| \leq 0.5$ 时,其数值模拟的结果示于图 8.11 (b) 中。可见在此情况下,孤子态也是稳定的。

但是,当在动力学方程中的上述五个参数同时变化时,它们对孤子态的影响会更加逼真和有意义。例如,在结构无序效应引起物理参数变化为 $\Delta J = \pm 5\% \bar{J}$, $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = \pm 5\%(\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$, $\Delta W = \pm 10\% \bar{W}$, $0.67 \leq \alpha_k \leq 2$, $\Delta\varepsilon_0 = |\beta_n|$, $\dot{\varepsilon} = 0.4 \text{ meV}$, $|\beta_n| \leq 0.5$ 时,用 4 阶 Runge-Kutta 方法求得的结果示于图 8.11 (c) 中。这幅图表明在此种扰动作用下,孤子态的特性未发生变化,仍能保持其形状进行传递。

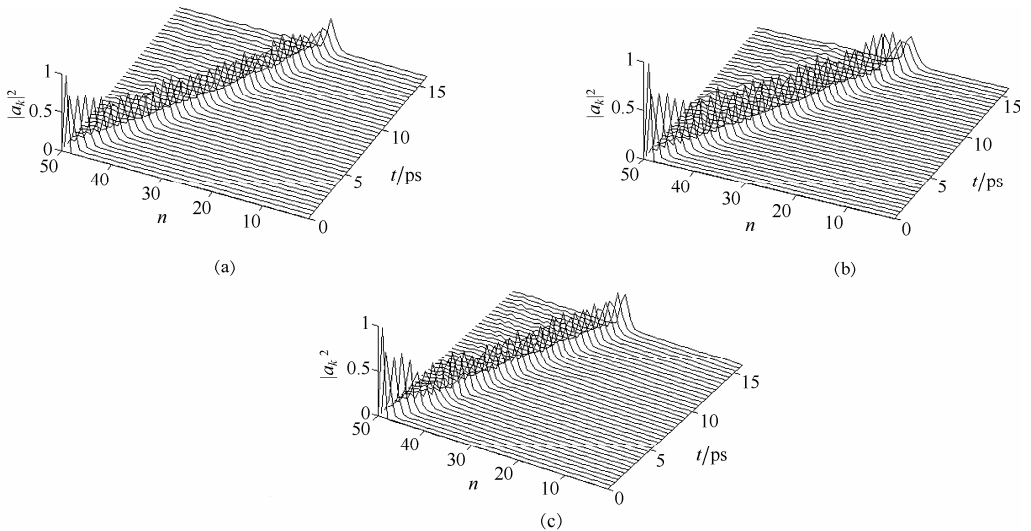


图 8.11 (a) 对于 $\Delta\varepsilon_0 = \varepsilon\delta_n$, $\varepsilon = 0.5 \text{ meV}$ 和 (b) $\Delta\varepsilon_0 = \varepsilon|\beta_n|$, $\varepsilon < 1 \text{ meV}$, $|\beta_n| \leq 0.5$ 以及在 (c) $\Delta W = \pm 10\% \bar{W}$, $\Delta J = \pm 5\% \bar{J}$, $\Delta(\chi_1 + \chi_2) = \pm 5\%(\bar{\chi}_1 + \bar{\chi}_2)$, $0.67 \leq \alpha_k \leq 2$ 和 $\Delta\varepsilon_0 = \varepsilon|\beta_n|$, $\varepsilon = 0.4 \text{ meV}$, $|\beta_n| \leq 0.5$ 的结果

但是,蛋白质分子的实际结构无序情况至今并未弄清楚,而它的真实结构无序和动力学参数的变化也未曾具体测试过。所以,蛋白质分子的真实结构无序和它对孤子态的影响很难确定。一般来讲,由于蛋白质是高度有序的生物组织,所以大的无序是不可能出现的。上述的数值模拟结果表明在大的结构无序的影响下,所产生的孤子态的稳定性没有发生变化或改变不大。这表明这类孤子态能坚强地抵制结构无序的影响。由此,得出这类孤子在现实的结构无序存在时也能在蛋白质分子中稳定地进行传递。从这个意义上讲,庞小峰模型中的孤子是结构稳定的。

8.4.3 系统的温度和介质的阻尼特性对非线性粒子的影响

在以上的研究中,未考虑介质的阻尼衰减和温度变化等的影响。实验证明温度

升高可以使蛋白质构象变化和变性，这意味着温度能改变氨基酸分子的运动状态。同时，蛋白质分子所存在的环境介质的阻尼作用既可改变氨基酸的状态，又可改变分子中 $C=O$ (酰胺键) 的振动状态，但主要是改变氨基酸分子的运动状态。则这些效应在研究中也会认真加以探索。在这种研究中，庞小峰采用 Lomdahl 和 Kerr 等人的方法，即将由温度产生的无规噪声力 $F_n(t)$ 和阻尼作用引起的耗散力 $M\Gamma\dot{q}_n$ 加进氨基酸残基的动力学方程式 (8.27) 中。对于 Davydov 模型，Lomdahl 等人曾在早期用的同样方式考察了它们对 Davydov 孤子态的热稳定性的影响。结果证明了 Davydov 孤子是热不稳定的，在 300 K 的生理温度时被完全破坏。现在，庞小峰采用这一方法研究了庞模型的孤子态的稳定性。此时，式 (8.27) 变成

$$\begin{aligned} M\ddot{q}_n(t) = & W[q_{n+1}(t) - 2q_n(t) + q_{n-1}(t)] + 2\chi_1[|a_{n+1}|^2 - |a_{n-1}|^2] + \\ & 2\chi_2\{a_n^*(t)[a_{n+1}(t) - a_{n-1}(t)] + a_n(t)[a_{n+1}^*(t) - a_{n-1}^*(t)]\} - \\ & M\Gamma\dot{q}_n + F_n(t) \end{aligned} \quad (8.71)$$

这里 Γ 是介质的阻尼系数，由温度引起的无规噪声力的相关函数按统计物理学的方法可以写成

$$\langle F(x,t)F(0,0) \rangle = 2M\Gamma K_B T \frac{\delta(x)\delta(t)}{\tau} \quad (8.72)$$

现在假设这种随机无规偏离满足具有标准偏离为 $\sqrt{\sigma}$ ，其期待值为零的下面的正态分布：

$$N(F_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-F_n^2/2\sigma}$$

式中， $\sigma = 2MK_B T \Gamma / \tau$ ，其中 τ 是时间常数； Γ 是环境的阻尼系数，它是时间的倒数。则无规噪声力可表示成

$$F_n(t) = \sqrt{6} \sum_{r=1}^L \left[X_{nr}(t) - \frac{1}{2} \right]$$

这里 $X_{nr}(t)$ 是处于 (0, 1) 之间的随机数。如果让 $L = 12$ ，则 $[X_{nr}(t) - 1/2]$ 的偏离刚好为 $1/12$ ，则 $F_n(t)$ 的标准偏离刚好为 $\sqrt{\sigma}$ ，于是无规噪声力 $F_n(t)$ 的值为 $|F_n(t)| \leq 6\sqrt{\sigma}$ 。

利用这里确定的 $F_n(t)$ 的值，从式 (8.67)、式 (8.68) 和式 (8.71)，用 4 阶 Runge-Kutta 方法，沿着上述的计算路线，庞小峰等人能求出在生理温度 $T = 300$ K 时的孤子态的传播特性。其结果如图 8.12 所示。此图表示在经过 50 个氨基酸残基后孤子态仍能保持其传播振幅和速度不变。因此，生理温度未影响孤子态的稳定特性。但是，此种

模拟仅考虑了它的传递距离为 50 个氨基酸酸残的情况，显得传播距离太短。至此，庞小峰等人用相同的方法考查了传播经过 400 个氨基酸酸残后的孤子态的特性。其结果示于图 8.13 中。

从图 8.13 中可见，在这样长的传递过程中，这些孤子态仍能保持其状态不改变，体现了它的强热稳定性。图 8.13 也表明在 $T = 300\text{ K}$ 时，此孤子态能经历 300 ps 的长时间后仍是热稳定性的。这表明此孤子态的寿命至少为 300 ps。这与前面求出的寿命一致。可见前面的寿命计算值和计算方法是正确的。

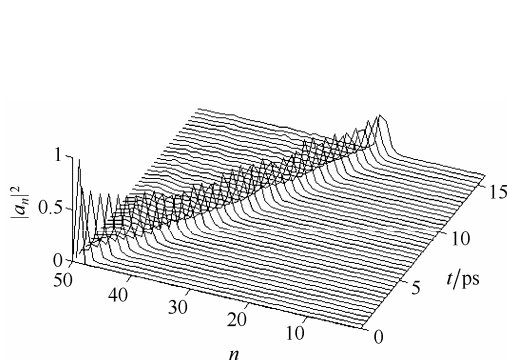


图 8.12 在 $T = 300\text{ K}$ 时孤子态的传播特性

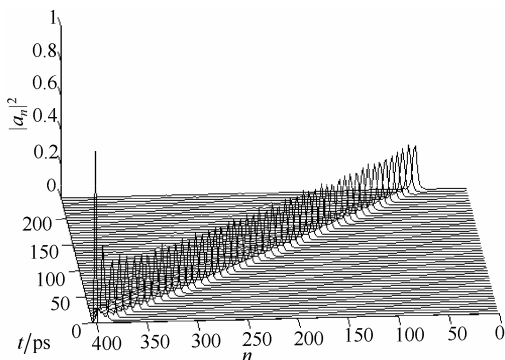


图 8.13 $T = 300\text{ K}$ 和 300 ps 后的孤子的状态

但是，如果介质温度升高时，所形成的孤子态的性质是会发生变化的。对此，庞小峰等人继续考察了在温度升高到 310 K 和 320 K 时所形成的孤子态变化的情况。其结果示于图 8.14 中。可见，在 310 K 时孤子态是稳定的，但在 320 K 时就开始色散了，并逐渐破坏。这表明此孤子态的临界温度为 320 K。

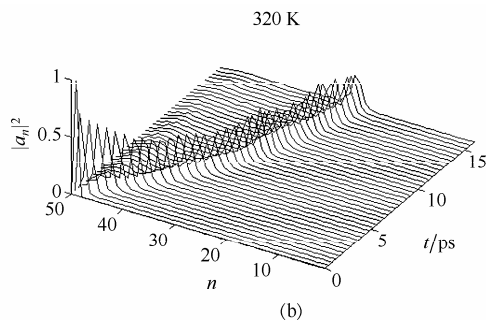
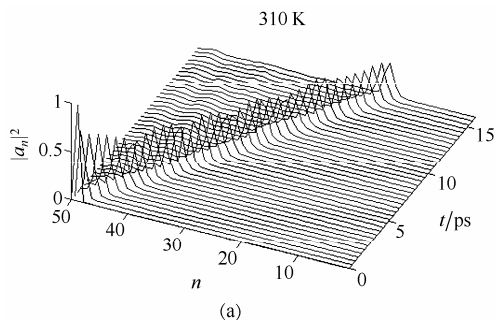


图 8.14 在 (a) 310 K 和 (b) 320 K 的温度时孤子态的情况

由以上研究可得出，由式 (8.31)～式 (8.32) 描述的微观粒子在 300～310 K 时在蛋白质分子中的生成孤子态是热稳定的，它的寿命至少为 300 ps，其临界温度为 320 K。

因此, 孤子态在 300 K 的生理温度下是热稳定的。

但是 Davydov 模型的孤子态的热稳定性并非这样。Förner 使用了相同的方法数值模拟了 Davydov 孤子态在不同温度时的状态。结果发现 Davydov 孤子态在 $T = 30$ K 时是热稳定的, 而在 $T = 40$ K 时就色散, 在 300 K 的生理温度时则完全色散。其在 $T = 40$ K 和 300 K 时的孤子态示于图 8.15 中。因此, Davydov 孤子态在 300 K 时不是热稳定的。

以上是在单链蛋白质分子中微观粒子(激子)的孤子态的热稳定性。同时庞小峰等人用以上方法和式(8.67)~式(8.70)或式(8.71)的数值模拟了由三条链组成的 α 螺旋蛋白质分子所形成的孤子态的稳定性。在此情况下, 在式(8.67)~式(8.70)和式(8.71)还应加上三条链之间的链与链之间的相互作用。这种作用会影响孤子态的热稳定性。所得结果表明, 由于庞小峰模型中的孤子具有极大的束缚能, 于是它能抵制蛋白质的结构无序和温度与阻尼的影响, 在生理温度为 300 K 时, 所形成的孤子态仍是热稳定的。因此, 通过上述研究能肯定由庞小峰模型描述的蛋白质分子中微观粒子(激子)的孤子态是热稳定的, 它能强烈抵制或抑制分子结构的无序和非均匀性及介质的温度和阻尼造成的破坏效应。因此, 它是蛋白质分子传递生物能量的真正载流子。从而证明了在非线性系统中, 具有孤子状态的微观粒子是十分稳定的, 而且是客观存在的。这也使庞小峰的生物能量传递的理论得到了进一步证实。

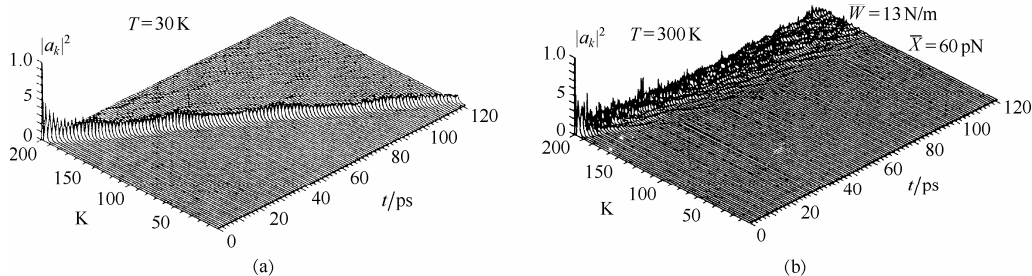


图 8.15 (a) $T = 40$ K 和 (b) $T = 300$ K 时 Davydov 模型的孤子态的特征

8.5 在蛋白质分子中非线性激发的本征能谱计算

关于非线性 Schrödinger 方程所对应的哈密顿算符的本征能谱的计算已在第 3 章给出了计算的方法和公式, 它是将微观粒子的状态波函数量子化后, 在二次量子化的表象中给出了系统的哈密顿算符的本征方程和本征函数, 如方程式(3.118)至式(3.122)所示。用对应的 $n \times n$ 阶的代数方程可算出其本征能谱。由于蛋白质分子中的微观粒子(激子)的孤子态是满足非线性 Schrödinger 方程式(8.28)的。于是, 可用第 3

章的方法求出哈密顿算符的本征能谱。由于单链蛋白质分子的每链有三个振动模，则它可用三阶矩阵的对角化来求出其本征能谱。对于三链的 α 螺旋蛋白质分子则有9个运动模，计算较为复杂。这里主要介绍 α 螺旋蛋白质分子的本征能得到的计算方法。在这种情况下，在式(8.22)和式(8.23)的系统哈密顿量和相应的波函数现在分别表示为

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{n\alpha} \varepsilon_0 \left(B_{n\alpha}^+ B_{n\alpha} + 1/2 \right) - J \sum_{n\alpha} \left(B_{n\alpha}^+ B_{n+1\alpha} + B_{n\alpha} B_{n+1\alpha}^+ \right) + \\
 & \sum_{n\alpha} \left[P_{n\alpha} / 2M + \beta / 2 (u_{n\alpha} - u_{n-1\alpha}) \right] + \\
 & \sum_{n\alpha} \left\{ \left[\chi_1 (u_{n+1\alpha} - u_{n-1\alpha}) B_{n\alpha}^+ B_{n\alpha} + \right. \right. \\
 & \chi_2 \left(B_{n\alpha}^+ B_{n+1\alpha} + B_{n\alpha} B_{n+1\alpha}^+ \right) (u_{n+1\alpha} - u_{n\alpha}) + \\
 & \left. \left. \tilde{L}_{n\alpha} \left(B_{n\alpha} B_{n+1\alpha}^+ + B_{n\alpha}^+ B_{n+1\alpha} \right) \right] \right\} \quad (8.73)
 \end{aligned}$$

和

$$\begin{aligned}
 |\Phi_p(t)\rangle = & \frac{1}{\lambda} \left[1 + \sum_{n\alpha} \varphi_{n\alpha}(t) B_n^+ + \frac{1}{2!} \left(\sum_{n\alpha} \varphi_{n\alpha}(t) B_n^+ \right)^2 \right] |O\rangle_{\text{ex}} \times \\
 & \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sum_{n\alpha} [q_{n\alpha}(t) P_{n\alpha} - \pi_{n\alpha}(t) u_{n\alpha}] \right\} |O\rangle_{\text{ph}} \quad (8.74)
 \end{aligned}$$

这里用 $q_{n\alpha}(t)$ 代替了在式(8.22)中的 $\beta_n(t)$ ， $\tilde{L}_\alpha = 1.5 \text{ meV}$ 是三链 α 螺旋蛋白质分子的链和链之间的相互作用， $\alpha = 1, 2, 3$ 是氨基酸分子组成的分子长链的编号。

用上述系统的波函数和哈密顿量，从海森堡方程式(8.26)和含时的 Schrödinger 方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle = H |\Phi(t)\rangle$ 可求出在三链 α 螺旋蛋白质分子中激子和氨基酸残基位移的分立动力学方程分别为

$$\begin{aligned}
 i\hbar \dot{\varphi}_{n\alpha}(t) = & \dot{\varphi}_0 \varphi_{n\alpha}(t) - J [\varphi_{n+1\alpha}(t) + \varphi_{n-1\alpha}(t)] + \\
 & \chi_1 [q_{n+1\alpha}(t) - q_{n-1\alpha}(t)] \varphi_{n\alpha}(t) - \tilde{L}_\alpha [\varphi_{n\alpha+1}(t) + \varphi_{n\alpha-1}(t)]
 \end{aligned}$$

和

$$M \ddot{q}_{n\alpha} = W [q_{n+1\alpha}(t) - 2q_{n\alpha}(t) + q_{n-1\alpha}(t)] + 2\chi_1 [|\varphi_{n+1\alpha}(t)|^2 - |\varphi_{n\alpha}(t)|^2]$$

庞小峰用前面方法，从以上分立动力学方程式求得激子的分立化的动力学方程为

$$\left(i \frac{d}{dt} - \omega_0 \right) \varphi_{n\alpha} + J (\varphi_{n+1\alpha} + \varphi_{n-1\alpha}) + \frac{1}{2} G (|\varphi_{n\alpha}|^2) \varphi_{n\alpha} + \tilde{L}_\alpha (\varphi_{n\alpha+1} + \varphi_{n\alpha-1}) = 0 \quad (8.75)$$

这里 $\varphi_{n\alpha}(t)$ 是一个在 α 链的第 n 位置的复数矢量波矢， $G = 8(\chi_1 + \chi_2)^2 / W(1 - s^2)$ 是

一种非线性相互作用, $\dot{\phi}_0 = \hbar\omega_0 (\hbar=1), s=v/v_0, v$ 是激子的速度, v_0 是声速。相应于式(8.75)的系统的有效哈密顿量为

$$H_e = \sum_{n\alpha} \left[\omega_0 |\varphi_{n\alpha}|^2 - J (\varphi_{n+1\alpha}^* \varphi_{n\alpha} + \varphi_{n\alpha}^* \varphi_{n+1\alpha}) - \frac{1}{2} G |\varphi_{n\alpha}|^4 \right] + \sum_{n\alpha} \tilde{L}_\alpha (\varphi_{n\alpha+1}^* \varphi_{n\alpha} + \varphi_{n\alpha}^* \varphi_{n\alpha+1})$$

系统的粒子数为

$$N = \sum_{n\alpha} |\varphi_{n\alpha}|^2$$

显然, 可以从式(8.75)得到以下的非线性 Schrödinger 方程:

$$\left(i \frac{d}{dt} - \omega_0 \right) \boldsymbol{\varphi} + \bar{\mathbf{M}} \boldsymbol{\varphi} + G \mathbf{D}(|\boldsymbol{\varphi}|^2) \boldsymbol{\varphi} = 0 \quad (8.76)$$

它是一个矢量的非线性 Schrödinger 方程。这里 $\boldsymbol{\varphi} = \{\varphi_{\alpha'}\}$ 是一个包含有 α' 个分量的复矢量波矢, 这里的 α' 表示了此系统中存在的运动模数。 $\mathbf{D}(|\boldsymbol{\varphi}|^2)$ 表示一个对角矩阵: $\text{diag}(|\varphi_1|^2, |\varphi_2|^2, |\varphi_3|^2, \dots, |\varphi_{\alpha'}|^2)$, $\bar{\mathbf{M}}$ 是一个实的对角矩阵。对于三链的 α -螺旋蛋白质分子, 则存在 9 个运动模, 即 $\boldsymbol{\varphi} = \text{Col}(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4, \varphi_5, \varphi_6, \varphi_7, \varphi_8, \varphi_9)$ 是一个 9 分量的复波矢, $\mathbf{D}(|\boldsymbol{\varphi}|^2) = \text{diag}(|\varphi_1|^2, |\varphi_2|^2, |\varphi_3|^2, |\varphi_4|^2, |\varphi_5|^2, |\varphi_6|^2, |\varphi_7|^2, |\varphi_8|^2, |\varphi_9|^2)$, $\bar{\mathbf{M}}$ 是 9 阶实对角矩阵, 可具体表示为

$$\bar{\mathbf{M}} = \begin{bmatrix} 0 & J & L_1 & L_2 & L_3 & L_3 & L_2 & L_1 & J \\ J & 0 & J & L_1 & L_2 & L_3 & L_3 & L_2 & L_1 \\ L_1 & J & 0 & J & L_1 & L_2 & L_3 & L_3 & L_2 \\ L_2 & L_1 & J & 0 & J & L_1 & L_2 & L_3 & L_3 \\ L_3 & L_3 & L_1 & J & 0 & J & L_1 & L_2 & L_3 \\ L_3 & L_3 & L_2 & L_1 & J & 0 & J & L_1 & L_2 \\ L_2 & L_3 & L_3 & L_2 & L_1 & J & 0 & J & L_1 \\ L_1 & L_2 & L_3 & L_3 & L_2 & L_1 & J & 0 & J \\ J & L_1 & L_2 & L_3 & L_3 & L_2 & L_1 & J & 0 \end{bmatrix} \quad (8.77)$$

在二次量子化表象中复数振幅或场量 (ϕ_n^* 和 ϕ_n) 可用产生和消灭标符 \hat{B}_n^+ 和 \hat{B}_n 来表示。它作用于粒子的态上, 则具有

$$\hat{B}_n |m_n\rangle = \sqrt{m_n+1} |m_n+1\rangle, \quad \hat{B}_n |m_n\rangle = \sqrt{m_n} |m_n-1\rangle \quad \text{和} \quad \hat{B}_n |0\rangle = 0$$

则系统的有效哈密顿算符和粒子数算符现在能够分别表示为

$$\hat{H}_e = \left(\omega'_0 - \frac{1}{2}G \right) \hat{N} - \frac{G}{2} \sum_i^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_i \hat{B}_i^+ \hat{B}_i -$$

$$J \sum_{i \neq j}^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_j - L_1 \sum_{i \neq j_1 \neq j}^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_{j_1} - L_2 \sum_{i \neq j_2 \neq j_1 \neq j}^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_{j_2} - L_3 \sum_{i \neq j_3 \neq j \neq j_1 \neq j_2}^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_{j_3} \cdots$$

和 $\hat{N} = \sum_i^9 \hat{B}_i^+ \hat{B}_i$ 。按照在第 3 章给出的方法，从 $\hat{H}_e |\psi_m\rangle = E_m |\psi_m\rangle$ ，这里 $|\psi_m\rangle = C_1 |m, 1\rangle + C_2 |m, 2\rangle + \cdots + C_d(m) |m, d(m)\rangle$ ，我们能得到式(3.122)，于是能求出蛋白质分子的本征能谱。但是，在此式和式(8.77)的矩阵中的参数 L_1 , L_2 和 L_3 需要加以确定。为此，采用 Scott 等人求出的 α 螺旋蛋白质分子的动力学方程

$$i \frac{dA_m}{dt} = -J(A_{n+1} - 2A_m + A_{n-1,l}) - K_1(R_{n+1,l} - R_{n-1,l})A_{nl} + LF_L +$$

$$K_2[(R_{n-1,l}A_{n-1,l} - R_{n+1,l}A_{n+1,l}) + R_{nl}(A_{n+1,l} - A_{n-1,l})] -$$

$$2JA_{nl} + NF_N + PF_P + QF_Q + SF_S + TF_T + UF_U + VF_V + XF_X + ZF_Z$$

$$\frac{d^2 R_{n,l}}{dt^2} - w(R_{n+1,l} - R_{nl} + R_{n-1,l}) = K_3(|A_{n+1,l}|^2 - |A_{n-1,l}|^2) +$$

$$K_4[A_{nl}^*(A_{n+1,l} - A_{n-1,l}) + A_{nl}(A_{n+1,l}^* - A_{n-1,l}^*)]$$

这里， $K_1 = \frac{1}{2 \times 10^{11} \hbar} \sqrt{\frac{M}{W}} \chi_1$ ， $K_2 = \frac{1}{2 \times 10^{11} \hbar} \sqrt{\frac{M}{W}} \chi_2$ ， $K_3 = \frac{10^{11}}{2W} \chi_1$ ， $K_4 = \frac{10^{11}}{2W} \chi_2$ 表示了 amide-I 的振动和氨基酸残基之间的各种非线性耦合， M 是一个单位元胞(氨基酸残基)的的质量的 1/3 的值， W 是劲度系数， χ_1 和 χ_2 分别是氨基酸分子单位延长所引起的

的振动能量的变化和偶极-偶极相互作用的变化，其中 J, L, N, P, Q, R, U, V ,

X, Y, Z 表示了 amide-I 键的各种不同的偶极-偶极相互作用。实测得知，它们分别为 7.8, 12.358, 3.873, 1.592, 1.0082, 0.637, 0.472, 0.387, 0.196, 0.159, 0.116, 0.09 cm^{-1} 。

利用这些值可求得式(8.77)中的 $L_1 = 16.23 \text{ cm}^{-1}$, $L_2 = 13.96 \text{ cm}^{-1}$, $L_3 = 15.363 \text{ cm}^{-1}$ 。利用在式(8.39)中广泛使用的 α 螺旋蛋白质分子的参数值和以上确定的 L_1 , L_2 和 L_3 的值，可求出在方程式(8.73)中的各参数值。对于 Davydov 模型， $\omega_0^1 = 1693.98 \text{ cm}^{-1}$ ， $J^1 = 7.80 \text{ cm}^{-1}$ ， $G^1 = 40.68 \text{ cm}^{-1}$ ；对于庞小峰模型， $\omega_0^2 = 1712.08 \text{ cm}^{-1}$ ， $J^2 = 7.8 \text{ cm}^{-1}$ ， $G^2 = 49.73 \text{ cm}^{-1}$ 。用式(3.122)进行本征能量的数值计算，可求出其哈密顿算符的本征能谱。当 $m=3$ 时，所得的能谱示于表 8.1 中。比较计算值和实验值可以看出，由庞小峰模型得到的能谱值比 Davydov 模型得到的理论值更接近于实验值，从而再次显示庞小峰模型的优越性。从表 8.1 可以看出，蛋白质分子的本征能谱具有以下特征。

(1) 这个能谱由多个能带组成, 对于一个特定的量子数 m 的值, 则它有多个能级。例如, 在 $m=1$ 时, 能级分布在 $1610\sim 1678\text{ cm}^{-1}$; 在 $m=2$ 时, 能级分布在 $3179\sim 3358\text{ cm}^{-1}$; 在 $m=3$ 时, 能级分布在 $4735\sim 5001\text{ cm}^{-1}$ 。这三个带所包含的能级个数分别为 8, 44 和 164 个能级。因此可以看出, 随 m 的增加, 能级的个数也逐渐增加, 则相邻能级之间的能隙 ΔE 也相应地逐渐变小。当 $m=1$ 时, ΔE 在 $6\sim 23\text{ cm}^{-1}$ 之间变化; 当 $m=2$ 时, ΔE 在 $0\sim 14\text{ cm}^{-1}$ 之间变化; 当 $m=3$ 时在 $0\sim 11\text{ cm}^{-1}$ 之间改变, 等等。

(2) 这些本征能谱具有强烈的局域性, 即两相邻能级之间的能隙大小强烈依赖于非线性相互作用参数 G , 这能从式 (8.73) 看出。这表明 G 的作用大于 J, L_1, L_2 和 L_3 的效果。

(3) 局域模的能级简并度随 m 的增加而增大。例如, 当 $m=2$ 时, 简并的能级仅为 3242 cm^{-1} 和 3259 cm^{-1} 。当 $m=3$ 时简并能级增加, 大约为 4725, 4738, 4737, 4857, 4859, 4866, 4869, 4870, 4878, 4879, 4916, 4918, 4924 cm^{-1} 13 个能级。因此能级简并度随量子数 m 的增加而增加。

表 8.1 三链 α -螺旋蛋白质分子的本征能谱 (cm^{-1})

m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)	m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)
1		1611.01	1610.42	1		1612.95	1612.01
1		1628.35	1627.64	1		1631.61	1630.11
1	1650	1654.37	1653.81	1	1662	1662.95	1661.98
1	1666	1668.23	1667.65	1		1679.27	1678.73
2	3150	3206.33	3179.40	2		3212.17	3203.19
2	3205	3213.6	3204.71	2		3224.25	3211.85
2		3225.39	3212.95	2		3226.57	3213.21
2	3216	3233.34	3216.84	2		3234.71	3218.19
2		3246.71	3242.48	2		3248.75	3242.45
2	3250	3252.57	3249.68	2		3259.67	3258.78
2		3260.85	3259.87	2		3263.57	3261.77
2		3264.66	3260.95	2		3265.73	3262.97
2		3267.91	3263.67	2	3267	3269.99	3267.39
2		3270.45	3269.43	2		3278.57	3277.71
2	3279	3279.97	3278.89	2	3280	3282.18	3280.21
2		3283.91	3282.84	2		3284.75	3283.97
2		3286.54	3285.44	2		3287.56	3286.49
2		3288.24	3287.44	2		3293.14	3290.49
2		3299.61	3298.96	2		3300.81	3300.09

2		3301.73	3301.15	2		3304.95	3302.13
2		3310.54	3309.47	2		3311.27	3310.21
2		3313.24	3312.91	2		3314.73	3313.37
2		3322.27	3321.54	2		3323.29	3322.49
2		3325.11	3323.56	2		3328.47	3327.96
2		3331.54	3329.16	2		3338.04	3333.91
2		3319.17	3345.11	2		3360.61	3358.58
3		4782.91	4735.46	3		4783.15	4735.96
3		4787.16	4736.91	3		4787.51	4737.08
3		4788.17	4737.54	3		4788.4	4737.64
3		4788.57	4738.21	3		4789.14	4738.54
3	4752	4789.68	4749.26	3	4803	4819.76	4805.31

(续表)

m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)	m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)
3		4819.95	4805.3	3		4823.84	4806.84
3		4825.25	4808.56	3		4826.45	4809.18
3		4829.18	4812.86	3	4813	4829.88	4813.76
3		4841.69	4824.16	3		4842.36	4824.96
3		4842.91	4825.51	3		4843.02	4826.33
3		4846.16	4830.52	3		4847.97	4831.91
3		4848.71	4832.61	3		4848.86	4833.15
3		4850.95	4834.67	3		4851.66	4836.24
3		4852.92	4836.46	3		4855.38	4837.21
3		4857.12	4839.73	3	4841	4858.92	4841.94
3		4859.24	4842.45	3		4860.42	4843.91
3		4861.44	4846.93	3		4862.66	4847.94
3		4862.97	4849.86	3		4864.35	4851.62
3		4866.61	4852.32	3		4868.62	4852.76
3		4869.92	4854.47	3		4870.62	4855.86
3		4872.21	4855.96	3		4873.12	4857.09
3		4873.57	4857.94	3		4875.32	4858.36
3		4875.66	4859.72	3		4876.24	4860.12
3		4877.01	4861.55	3		4877.65	4863.25
3		4879.12	4866.28	3		4879.49	4866.31
3		4879.92	4868.07	3		4880.73	4869.29
3		4881.04	4869.45	3		4881.36	4869.69
3		4882.37	4970.11	3		4883.71	4870.82

3		4887.31	4871.84	3		4887.63	4874.31
3		4888.61	4874.81	3		4889.36	4876.25
3		4889.71	4875.91	3		4890.12	4876.83
3		4891.82	4877.52	3		4892.56	4877.91
3		4892.72	4878.72	3		4893.32	4878.96
3		4894.24	4879.31	3		4895.27	4879.61
3		4895.76	4881.73	3		4896.62	4884.66
3		4897.96	4885.56	3		4898.96	4886.57
3		4899.32	4886.93	3		4900.70	4887.13
3		4901.09	4887.29	3		4901.27	4887.79
3		4902.32	4888.42	3		4902.67	4889.92
3		4903.24	4890.49	3		4903.42	4891.82

(续表)

m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)	m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)
3		4904.26	4893.42	3		4905.54	4894.32
3		4905.86	4996.62	3		4916.84	4897.83
3		4907.12	4898.56	3		4907.92	4899.37
3		4909.81	4899.81	3		4910.62	4901.83
3		4911.52	4905.21	3		4915.72	4906.32
3		4916.62	4907.52	3		4918.83	4909.51
3		4919.31	4913.52	3		4920.52	4914.72
3		4921.73	4914.89	3		4922.42	4915.67
3		4922.83	4916.08	3		4923.53	4916.21
3		4923.76	4918.42	3		4924.84	4918.93
3		4927.06	4919.92	3		4927.26	4921.83
3		4928.23	4923.66	3		4928.61	4924.26
3		4929.12	4924.96	3		4929.76	4925.36
3		4930.66	4926.92	3		4933.46	4927.30
3		4934.02	4928.61	3		4934.12	4929.93
3		4934.56	4930.46	3		4934.87	4931.06
3		4935.32	4931.84	3		4936.93	4932.96
3		4937.14	4933.52	3		4937.56	4933.91
3		4938.62	4934.36	3		4939.06	4934.86
3		4940.26	4935.96	3		4940.46	4937.32
3		4941.18	4938.11	3		4943.33	4939.39
3		4943.93	4939.98	3		4946.46	4941.62

3		4947.64	4941.96	3		4948.43	4944.72
3		4948.92	4945.17	3		4949.86	4945.68
3		4950.42	4947.86	3		4951.42	4947.94
3		4952.09	4948.42	3		4953.52	4949.32
3		4956.96	4949.73	3		4955.57	4952.81
3		4956.97	4954.82	3		4960.52	4958.22
3		4960.82	4958.82	3		4962.12	4958.96
3		4962.51	4959.92	3		4962.73	4960.12
3		4963.25	4960.16	3		4964.12	4960.61
3		4967.72	4961.05	3		4968.27	4965.52
3		4970.52	7965.84	3		4970.96	4968.97
3		4974.72	4969.91	3		4975.31	4973.61

(续表)

m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)	m	exp ^(a)	cal ^(b)	cal ^(c)
3		4978.30	4974.65	3		4979.62	4975.79
3		4980.92	4976.71	3		4981.42	4977.72
3		4981.92	4978.42	3		4982.32	4979.12
3		4987.82	4980.19	3		4988.32	4983.12
3		4988.92	4986.36	3		4991.92	4987.06
3		4992.51	4989.22	3		4992.53	4989.68
3		4993.26	4990.09	3		4993.99	4991.19
3		5003.81	5000.44	3		5004.97	5001.74
3		5022.86	5020.92	3			

注：(1) exp^(a)是实验结果值； (2) cal^(b)是 Davydov 模型下的计算值； (3) cal^(c)是在庞小峰模型下的计算值。

8.6 在分子晶体和蛋白质中激子局域的孤子态特性的实验证实

以上的理论研究和生物能量在蛋白质分子中的传递是建立在此系统中激子的非线性的激发和在自陷机制下局域性孤子态的运动基础上。这种在非线性系统中微观粒子的局域和孤子态运动是否在这些系统中真实存在便成为问题的关键。为此，需要用实验来加以证实。但是直接观察粒子的局域孤子存在很多困难，仅能从它们表现出的特性，特别是光谱特性来证实其客观存在和它的特性。这里陈述庞小峰和其他人的相关实验结果。

8.6.1 在乙酰苯胺中的实验数据

早在 1970 年, Careri 等人对具有两条肽群长链组成的乙酰苯胺(ACN)的红外和 Raman 光谱图进行全面测定, 以捕获其中产生的激子和它的非线性局域孤子特性。

(1) ACN 红外吸收和 Raman 散射光谱特性。Careri 等人用红外吸收光谱仪, 如 Nicolet 型 7000 傅里叶变换红外光谱仪测量了 amide-I 区域中的红外吸收质谱随温度的变化。所得到的谱用带宽为 0.5cm^{-1} 的红外吸收仪进行了 100 次扫描。样品的温度用液氮制冷器来调节和控制, 远红外吸收光谱用 Michelson 干涉仪进行测量, 而样品是由聚乙烯和 ACN 混合制成的小球组成的。纯净的聚乙烯小球用来测量背景的发射。其 Raman 谱是用具有波长为 488 nm 或 514.5 nm, 其功率为 20~200 mW 的稳定相干辐射的氟 52 离子激光器产生的。入射光用一个适当的干涉滤光片进行了滤波, 它的强度用束分离器和硅光室进行监控。散射光用 Tarrel-Ash 型 25-300 Raman 谱仪进行分析, 并使用了 ITT 型 FW-130 冷却光子多模器和能作光子计数的仪器进行检测。他们测量了 amide-I ($1600\sim 1700\text{ cm}^{-1}$), amide-II ($1500\sim 1600\text{ cm}^{-1}$), amide-III ($1300\sim 1500\text{ cm}^{-1}$), amide-IV ($1000\sim 1200\text{ cm}^{-1}$) 的红外吸收光谱。对于 amide-I 在 $1600\sim 1700\text{ cm}^{-1}$, $2500\sim 3500\text{ cm}^{-1}$, $4750\sim 4860\text{ cm}^{-1}$ 和 $6200\sim 6400\text{ cm}^{-1}$ 等范围内的红外光谱示在图 8.16 中, 其红外吸收的强度随温度变化的情况示于图 8.17 中。amide-I 在 $1630\sim 1700\text{ cm}^{-1}$ 和在 300 K 和 50 K 温度时的低频模的 Raman 谱分别示在图 8.18 和图 8.19 中。

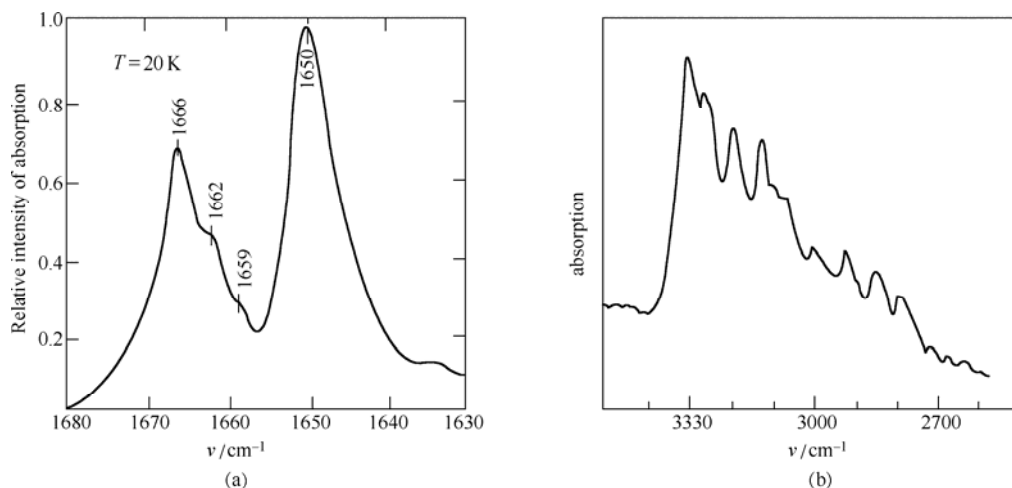


图 8.16 在 (a) $1600\sim 1700\text{ cm}^{-1}$ 和 (b) $2500\sim 3500\text{ cm}^{-1}$ 由 Careri 等人得到的 ACN 的红外吸收光谱

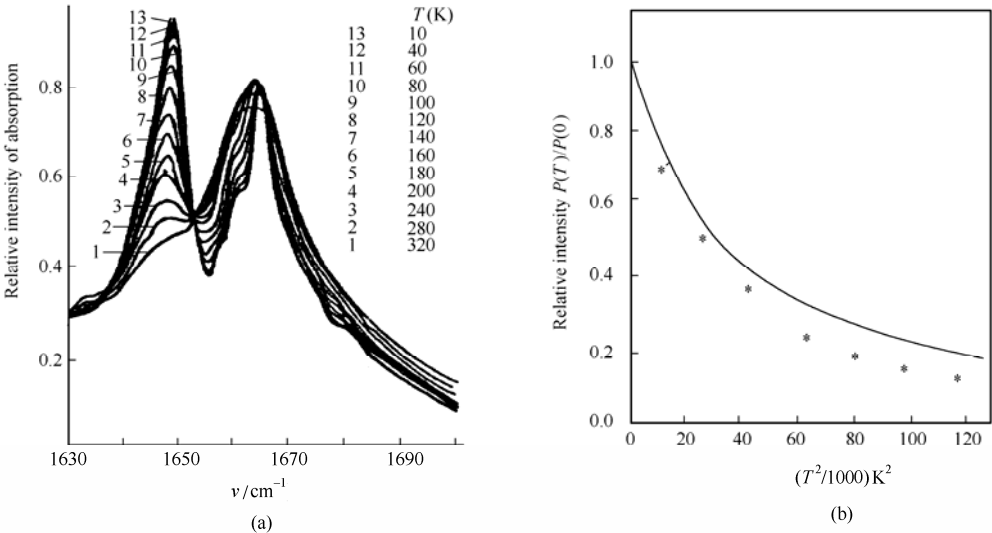


图 8.17 (a) ACN 的红外光谱吸收强度随温度的变化和 (b) 指数规律的理论值与实验值的比较

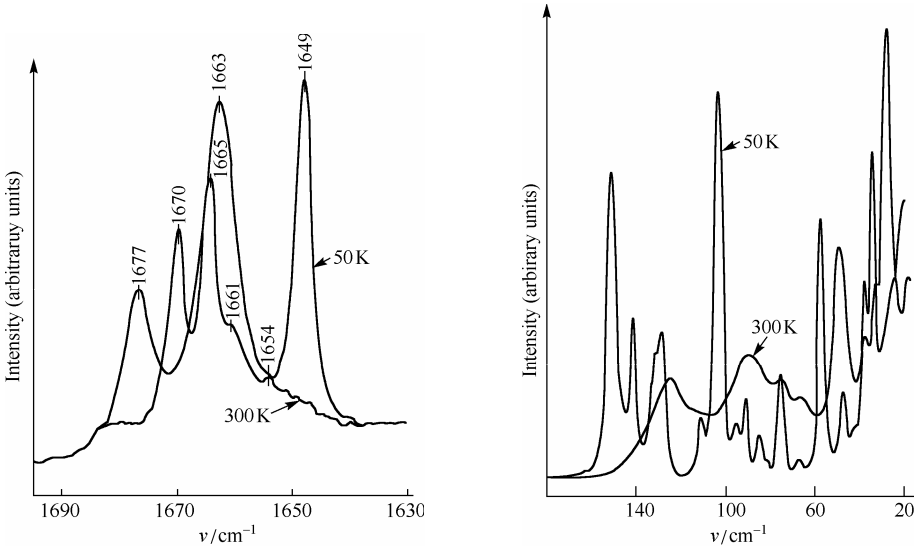


图 8.18 300 K 和 50 K 时在 1630~1700 cm^{-1}

图 8.19 在 300 K 和 50 K 时的低频谱范围内 ACN 的 Raman 谱

从 8.1 节可以知道, amide-I 的本征能谱是 1666 cm^{-1} , 1662 cm^{-1} 和 1659 cm^{-1} , 分别相应于 B_{2u} , B_{1u} , B_{3u} 模。在图 8.16(a) 和图 8.18 中出现的 1650 cm^{-1} 应当属于激子-孤子态。这表明由该理论预言的非线性激发模 1650 cm^{-1} 是真实存在的, 从图 8.17 可知

吸收强度随温度的增加以指数 $e^{-\beta T^2}$ 规律减少, 这与理论结果 $e^{-(c+\gamma T^2)}$ 是一致的。后者在图8.17(b)中用实线表示出, 前者用“*”表示。由此可以得出激子的非线性激发和它们的局域态是真实存在于系统之中的。

(2)在乙酰苯胺(ACN)中激子局域的孤子态特性。Fanm 等人用瞬态红外漂白实验测定了 1650 cm^{-1} 模的弛豫时间即寿命。在这种测量中, 所使用的光源是围绕 $6\text{ }\mu\text{m}$ (1650 cm^{-1}) 可调的光去激发 ACN 的 1666 cm^{-1} 和 1650 cm^{-1} 两个带, 并用具有 10 cm^{-1} 的谱分辨率的自由激光器(FET)观察。这两个带具有皮秒间隔和足够强度的脉冲去漂白这种跃迁, 以此来观察具有足够时间分辨率和信噪比的漂白过程的恢复特性, 从而来确定其激发的寿命。

Fann 等人所选择的源为 Mark 的 FEL, 它在一持续时间内能产生 $1.3\text{ }\mu\text{s}$ 的脉冲。

MarkIII 激光器的输出通过 CaF_2 楔形块将 95%的光进入泵中, 5%分给探针, 再用一个单透镜将以上两个脉冲聚焦成直径为 $300\text{ }\mu\text{m}$ 的光点照射到样品上。此样品是放在具有 CaF_2 窗的闭合制冷器中的, ACN 经反复升华的方法进行纯化, 其结晶畴是从在

厚度为 2 mm 的两个 CaF_2 板之间的熔化 ACN, 通过缓慢冷却的方法得到的。当泵脉冲与探针脉冲同步时, 关于 1650 cm^{-1} 带的泵-探针发射的重大增加是被观察到的。由于泵近似追踪到 1650 cm^{-1} 带(即泵和探针瞬时重复), 则在 0 ps 时的发射增加被推迟。这表明此时这个效应是相关于 1650 cm^{-1} 带的。这清楚地表明激子的非线性激发和孤子态此时在 ACN 中出现。在图 8.20 中示出了从多次扫描获得的、在这个带的中心处出现的漂白与恢复过程的动力学特性。此图中最快分量用脉冲持续时间限定, 而慢分量有一个 $15 \pm 5\text{ ps}$ 的时间推迟, 后者表征了由 1650 cm^{-1} 模的基态的占据时间引起的饱和和恢复。

于是可知 $15 \pm 5\text{ ps}$ 的弛豫时间表征了 1650 cm^{-1} 带是强烈地同晶格耦合, 于是它就是 ACN 中的振动线的弛豫时间, 或者说非线性激发的寿命。Fann 等人也测量了在 100 ps 时间内样品发射的恢复情况, 此时探针脉冲衰减到一个“冷”带线上。这表明 1650 cm^{-1} 带在把能量交付给 130 cm^{-1} 的光学声子时消失。我们期待在这样一个变化中引起的 1650 cm^{-1} 带的消失会导致在这 100 ps 时间内所产生这种发射的强度有大约两个数量级的增加。非常遗憾, 这个现象并未观察到。由此得出在 ACN 的非线性的孤子寿命略小于庞

小峰的理论预言的理论值。其原因可能是由于实验误差或仪器的准确度差造成的。因此这个实验还需要再做。

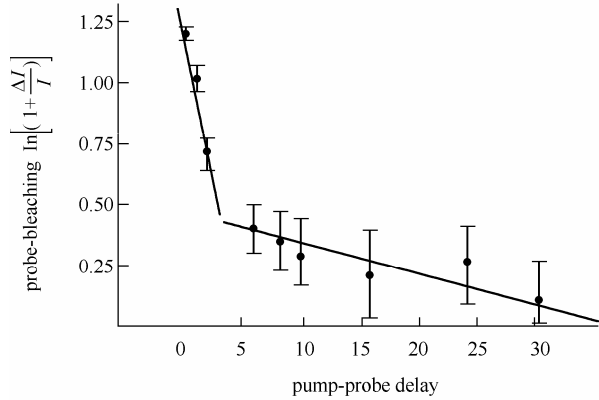
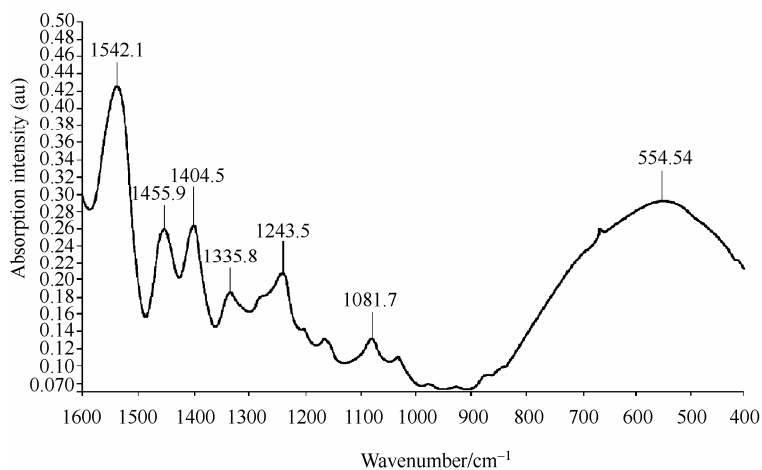


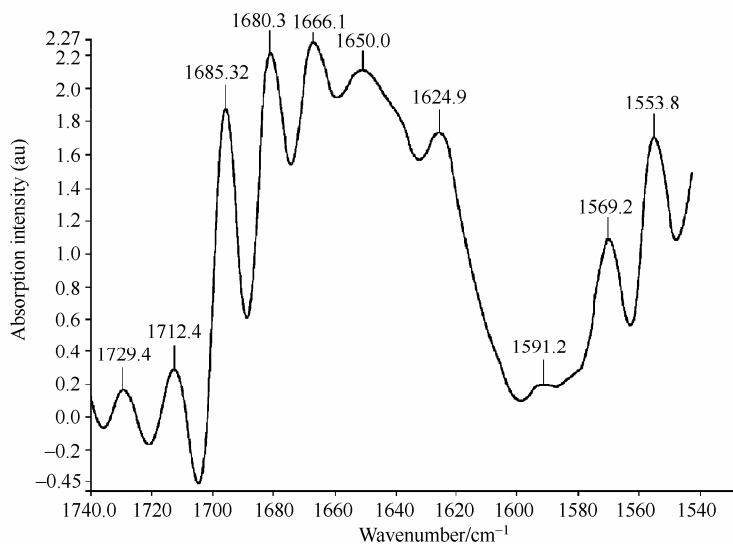
图 8.20 在 80 K 的附近 1650 cm^{-1} 探针漂白与泵-探针推迟的关系

8.6.2 蛋白质的红外吸收和Raman散射实验结果

首先研究胶原蛋白质分子中的非线性激发。胶原是由三条长链的螺旋折叠形成的具有超螺旋性四级结构的蛋白质分子。肖和兰及庞小峰详细测量了它的红外吸收光谱和它随温度的变化情况。此胶原是从美国 Sigma 公司购买的胶原晶体。同时，实验中也使用过从动物腿部提取的胶原- I 型纤维蛋白，经过纯化、去水和冻化后的样品。将它放入从德国购买的 Perkin Elmer GX-IR 红外光谱仪或美国生产的 Necolet 670 FI-IR 红外光谱仪的 Kbr 窗口中，其仪器的分辨率为 4 cm^{-1} 。在 25 $^{\circ}\text{C}$ 时用这些仪器测得的胶原蛋白质分子在 400~4000 cm^{-1} 范围的红外吸收谱，如图 8.21 所示。从图中可知在这种胶原蛋白质分子中也存在由 C = O 振动产生的 amide-I (1666.1 cm^{-1})，amide- II (1624 cm^{-1})，amide- III (1455.9 cm^{-1} ，1404.5 cm^{-1})，amide- IV (1335.8 cm^{-1} ，1243.5 cm^{-1}) 及 amide- V (1081.7 cm^{-1}) 的振动激发模。同时，在 2800~4000 cm^{-1} 的范围内也存在丰富的谱线。例如，3209.01 cm^{-1} ，3225.70 cm^{-1} ，3244.0 cm^{-1} ，3278.2 cm^{-1} 等谱线。这些谱线对应的能量列在表8.1中。从表8.1中可以看出，实验值与理论值很好地符合。同时，在这实验中也发现胶原蛋白质分子存在 1650 cm^{-1} 的非线性激发，可见在其中有局域的孤子态的存在。



(a)



(b)

图 8.21 胶原-I 型蛋白质在 25°C 和 $400\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ 范围内的红外吸收光谱

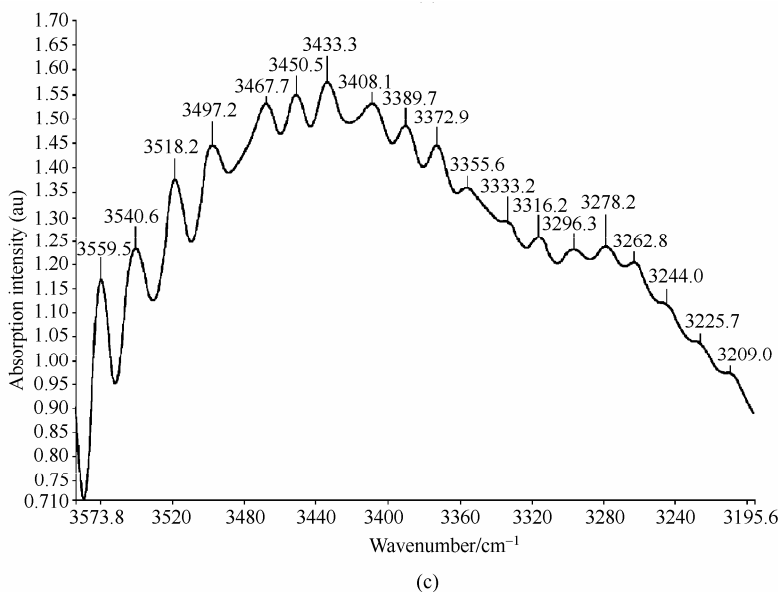


图 8.21 (续) 胶原- I 型蛋白质在 25°C 和 400~4000 cm^{-1} 范围内的红外吸收光谱

关于胶原蛋白质在 1000~1700 cm^{-1} 范围内的红外吸收强度随温度从 5°C 变到 95°C 时的改变的测量结果显示在图 8.22 中, 从图 8.21 中可看到 1666.11 cm^{-1} 模和 1650 cm^{-1} 模的吸收强度的改变规律刚好相反。对于 1666.1 cm^{-1} 峰的相对吸收强度随温度升高呈线性增加, 但对 1650 cm^{-1} 峰的相对强度却随温度的升高以指数 $\exp[-0.437 + 8.98 \times 10^{-6} T^2]$ 的规律下降, 如图 8.23 所示。在此图 8.23 (a) 中示出相对强度的对数随温度的变化, 可看见, 它们近直线变化。这与 ACN 中的孤子理论方法求得的 $\exp[-\beta T^2]$ 变化规律相似。这些实验结果有力地证明了蛋白质分子中存在非线性激发和运动, 其中的激子是被局域化的孤子态。如果用从大鼠的大腿中取出的胶原纤维蛋白质进行纯化和去水后进行 Raman 光谱的测定, 也发现存在 1670 cm^{-1} 和 1650 cm^{-1} 的振动模的存在, 如图 8.24 所示。这从另一角度证实了激子和孤子运动模的存在。

8.6.3 E.col(大肠杆菌)的红外吸收谱线

在 20 世纪 80 年代 Webb 等人用激光-Raman 谱测量了在低温下的大肠杆菌(E.col)的 Raman 谱, 如图 8.25 所示。这个谱的基本特性是存在波数为 182 cm^{-1} , 152 cm^{-1} , 123 cm^{-1} , 108 cm^{-1} , 90 cm^{-1} , 85 cm^{-1} , 63 cm^{-1} , 52 cm^{-1} 和 45 cm^{-1} 的 9 条谱线, 与在图 8.19 中示出的在 50 K 低温下测量的 ACN 的谱线很相似。同时, 这些谱线可从对 α 螺旋蛋白质分子使用庞小峰理论求得的分子能谱(参见表 8.1)中得出。当 $m = 2$ 时, 由表 8.1 所示给出的几条特殊能谱求出的光谱跃迁谱线示在图 8.26 中, 从此图也给出 179.1 cm^{-1} ,

154.5cm^{-1} , 122.1cm^{-1} , 107.1cm^{-1} , 90.7cm^{-1} , 83.9cm^{-1} , 63.0cm^{-1} , 55.0cm^{-1} , 44.9cm^{-1} 等 9 条谱线, 它们与图 8.25 给出的 9 条谱线十分接近。这绝不是一种偶然, 而是证实了 E.Col 中的蛋白质分子确实存在非线性激发。

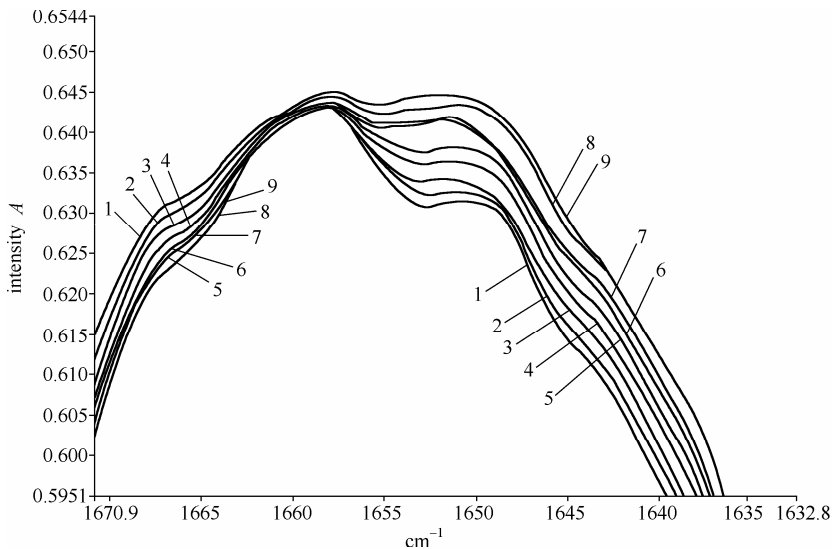


图 8.22 在胶原蛋白分子中 amide-I 振动激发的红外光强度在温度为 (1) 95°C, (2) 85°C, (3) 75°C, (4) 65°C, (5) 55°C, (6) 45°C, (7) 35°C, (8) 28°C 和 (9) 15°C 时的变化情况

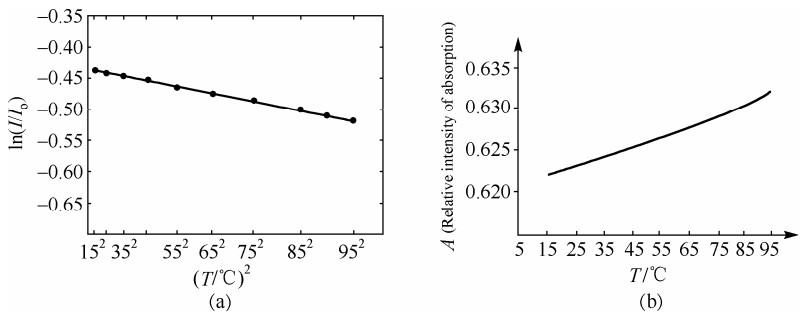


图 8.23 (a) 1650cm^{-1} 峰和 (b) 1666.1cm^{-1} 峰的红外吸收强度随温度升高时的变化特性

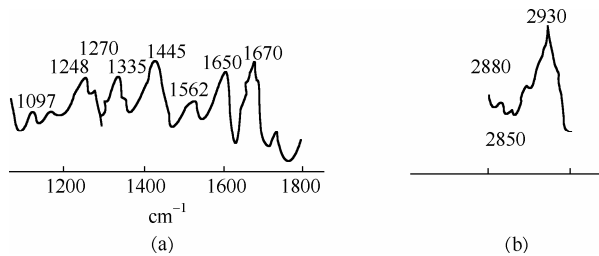


图 8.24 胶原蛋白质在 $1000\sim1800\text{cm}^{-1}$ 和 $2600\sim4000\text{cm}^{-1}$ 范围内的 Raman 谱线分布

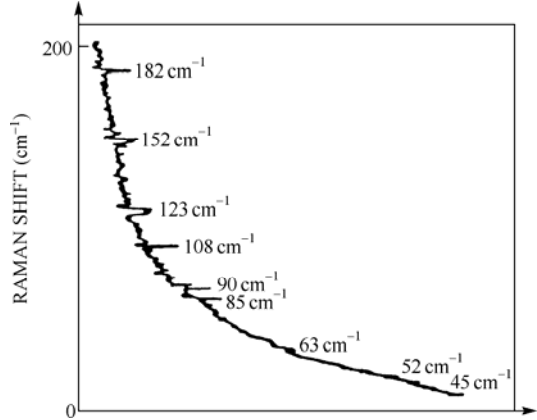


图 8.25 Webb 的激活 E.coli 的激光-Raman 谱

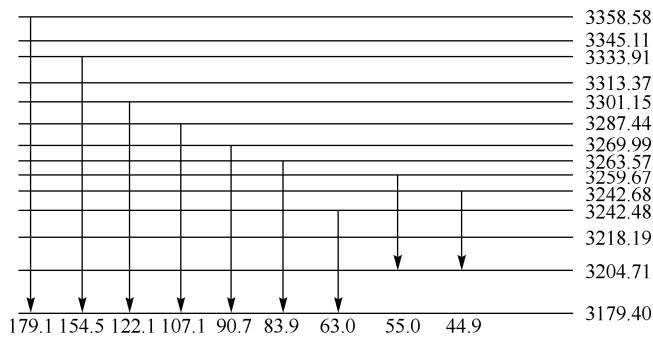


图 8.26 由 α 螺旋蛋白质分子在 $m=2$ 时的能谱(参见表 8.1)中求出的光谱线

8.6.4 ACN和蛋白质分子的比热容

Careri 等人在 20 世纪 80 年代测量过 ACN 在室温时的比热容，并得到一个公式为

$$C(T) = 4.59 \times 10^{-3} T + 1.505 \tag{8.78}$$

式(8.78)中比热容的单位为 $\text{Jg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ， T 为温度，它的单位为 $^{\circ}\text{C}$ 。这个关系可从前面建立的理论中求出。事实上，当考虑系统的温度时，在一阶近似下，示在式(8.15)中的 ACN 中的激子的运动方程现在可近似表示成

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(x,t)}{\partial t} = [\varepsilon_0 - 2JB(T,q)]\varphi(x,t) - Jr_0^2 B(T,q) \frac{\partial^2 \varphi(x,t)}{\partial x^2} + G|\varphi|^2 \varphi \tag{8.79}$$

这里 $JB(T,q) = \frac{\hbar^2}{2mr_0^2} e^{-\tilde{W}_n}$ ，其中，

$$\tilde{W}_n \approx \sum_q \left((1 + \nu_q) \beta_{qn\pm 1} \beta_{qn}^* - \nu_q \beta_{qn\pm 1}^* \beta_{qn} + \left(\nu_q + \frac{1}{2} \right) \left(|\beta_{qn}|^2 + |\beta_{qn\pm 1}|^2 \right) \right) \approx \frac{1}{2} r_0 \delta_0 |\varphi_n|^2 B'F(q,r)$$

$$\text{这里, } \delta_0 = \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2}{8r_0\beta(1-s^2)J\omega_0^2}, \quad B' = \frac{\pi r_0(\chi_1 + \chi_2)^2}{4\omega_0^2\beta v_0^2\hbar(1-s^2)}, \quad F(q, r) = \frac{r_0}{\pi N} \sum_q (1+r_q)|q|$$

此式子的孤子解具有如下形式

$$\varphi(x, t) = \sqrt{\frac{G'(T)}{8J}} \operatorname{sech} \left[\frac{G'(T)}{2Jr_0} (x - x_0 - vt) \right] \exp \left[\frac{i\hbar v}{2Jr_0^2} (x - x_0) - \frac{iE_{\text{sol}}t}{\hbar} \right]$$

$$\text{其中, } G'(T) = \frac{\hbar^2(\chi_1 + \chi_2)^2 r_0^2}{M\omega_0^2 v_0^2 (1-s^2)} \left[1 - \frac{1}{4} B' F(q, T) \right]$$

其中相应的运动孤子所具有的能量为

$$E_{\text{sol}} = (\varepsilon_0 - 2J) + \frac{1}{2}mv^2 - \frac{\hbar^4(x_1 + x_2)^4(1-5s^2)}{24\omega_0^4\beta^2(1-s^2)^3 J} \left[1 - \frac{1}{4} B' F(q, T) \right]^2$$

则由这些孤子的热运动导致的比热容可表示成

$$C_v = \frac{dE}{dT} = \frac{\hbar^4(x_1 + x_2)^4 B'(1-5s^2)}{48\omega_0^4\beta^2(1-s^2)^3 J} \left[1 - \frac{1}{4} B' F(q, T) \right] \frac{dF(q, T)}{dT}$$

在高温 $K_B T \gg \hbar\omega_q$ 条件下, 有

$$F(q, T) = \frac{2K_B T}{\hbar v_0 \pi}$$

由以上结果可最后求得 ACN 的比热容可表示成

$$C_v = K_B (\alpha + bT) \quad (8.80)$$

这里温度 T 用热力学温标表示。使用 ACN 中物理量的参数值, 可求出 $\alpha = 5.15$, $b = 0.0199 \text{ K}^{-1}$ 。则得到的结果与 Carer 等人测得的结果式 (8.78) 相接近。在蛋白质中也有类似结果, 仅 a 和 b 值不一样。碰巧 Mrevishvill 和 Goldunskii 等人测量过蛋白质和 DNA 分子的比热容, 得到了 $C_v = K_B(\alpha' + b'T)$, 它也与式 (8.78) 和式 (8.80) 很类似。这些结果同样证明上述理论是正确的。

8.7 氢键系统中质子的非线性激发

8.7.1 氢键结构和氢键系统中的质子运动

一般来讲, 一个中性的氢原子通常只能和另外的原子结合成一个共价键。但在晶体或分子系统中, 每个氢原子可以同时与两个电子亲和力大的, 原子半径较小的原子 (如 O, N, C, F 等) 结合在一起, 其中在同一个方向上是结合较紧的共价键 (短键), 在另一个方向上靠其原子的非球形对称性所产生的偶极-偶极相互作用力构成一个

分子键(长键)。这种价键结构称为氢键。例如在甲酸二聚分子(HCOOH)₂的结构中,由电子衍射法测得其时的 H 原子与一个 O 原子结合的共价键 O—H 的长度为 0.104 nm,而与另一个 O 原子结合成的长键 $\text{O}\cdots\text{H}$ 的键长为 0.163 nm。一般来讲,所谓氢键是指由长键与短键组成的整体,常用“ $\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}$ ”来表示,这里 X 表示重离子及负极性原子团,在甲酸二聚分子中 X 表示 O 原子。现在查明它是晶体和分子结构的一种重要原子结合的价键形式。当它们组成晶体或分子时,使人奇怪的是这一些氢键连结在一起,形成一种氢键链状系统, $\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}-\text{H}\cdots$ 或一个之字形。

在许多晶体和高分子中都可以发现这种系统,如在固态的氟化氢(HF)₂、冰晶体、固态酒精、碳水化合物的糖类、咪唑、乙酸苯胺晶体、蛋白质和 DNA 等中,特别是在生命系统中大量存在这种结构。蛋白质的三维结构就是靠其中氢键的支撑而构成的, DNA 中与遗传紧密相关的四对碱基(基因)的配对也是由氢键实现的。所以氢键在生物大分子的结构和功能及生命组织和生命活力中扮演了重要角色。同时,它也是细胞膜中离子通道存在的分子基础,并会在揭示植物光合作用的分子机理中起到关键性作用。因此,研究氢键结构及其特性对于揭示生命的奥妙具有极其重要的意义。

物理学家在此之前是很少关注这类物质结构形态,因此,对它的特性缺乏深入研究。在像冰这种氢键系统中实验测定有一个奇特的现象出现,即沿分子链的电导率大于垂直方向 $10^3\sim 10^4$ 倍,仅比一般的金属差一个数量级,所以人们常称它为“质子半导体”。这种质子的高导电性在菌紫质中得到了充分证实,实验测得在这类细菌中有质子的大极化和通道存在。从而引起了物理和生物学家对它的广泛关注。但是,至今人们并不清楚氢键系统为什么具有如此高的导电性。它的机制是什么?以及导电形式如何等问题确实使人感兴趣和深思。冰晶体是最简单的氢键分子系统,在正常条件下,它具有六角结构。围绕着每个氧原子,在一个正交四面体的每个顶点处存在另一个氧原子。每一个水分子与另 4 个水分子分别用 4 个氢键连结起来形成了一个四面体,其氢键的长度大约为 0.276 nm,较甲酸二聚分子的 0.267 nm 稍长些。其中的质子以共价键形式与邻近的氧原子相连,其键长为 0.099 nm,而以长键形式与另一个氧原子相关,其间距为 0.177 nm。

在研究冰中质子的传递过程中,常认为这种氢键链是一个 Bernal-Fowler 线。后者是由氢键形成的水分子的无限周期链,于是常把冰晶体当做一种准一维结构的分子链。在这种链中的每一个水分子都会选出一个质子去形成一个氢键,同时另一个质子与氧原子形成一个共价键,它不去参与质子在链中的传递过程。于是这个水分子链可以分解成两个子晶格,即由 OH^- 群形成的基础晶格和质子子晶格。每一个质子通过共价键与氧相关,通过氢的长键影响氢键。在这种情况下,结构 $\text{X}\cdots\text{H}-\text{X}\cdots\text{H}-\text{X}\cdots\text{H}-\text{X}\cdots\text{H}-\text{X}$ 与结构 $\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}-\text{H}\cdots\text{X}-\text{H}\cdots\text{H}\cdots\text{X}$ 具有相同的能量,

这表明氢原子在两个 X 原子或 O 原子(冰)中有两个平衡位置,它与左边 X 原子,也可能与右边 X 原子构成共价键,而长键的位置刚好反调。由此看出在两个 X 原子之间有一个势垒存在,而质子处在由相邻两个 X 原子提供的双阱势的势场中。氢键系统的一个重要特征就是在每一个氢键中存在有对称性的双阱势能,它的两个最小值相应于质子的两个平衡位置,如图 8.27 所示。这个双阱势常用 $U(R_n) = U_0 \left[1 - (R_n^2 / R_0^2)^2 \right]$ 来表示,

这里 U_0 是势垒的高度, R_n 是从势垒顶部算起的质子位移, R_0 是局部最大和势阱最小值之间的距离,如图 8.28 所示。一般来讲,在稳定情况下链是准中性的。当质子位移时,电荷的局域性的重新分布将会在链中出现。一旦一个质子穿越势垒从一个势阱进入另一个势阱时,短键(共价键)和长键的位置将会交换。于是在这局部区域将出现一类缺陷,即质子系统的压缩而出现额外正电荷的聚集即 H_3O^+ 的正离子;而在相邻的一侧是质子系统的稀疏区域,出现额外负电荷的聚集即 OH^- 的负离子。这些都是质子位移导致的第一类缺陷即离子缺陷 H_3O^+ 和 OH^- 。 H_3O^+ 离子相应于畴壁的运动。在这个畴壁的左边的所有质子是处在双势阱的右阱中;在畴壁的右边的所有质子则处在左势阱之中。 OH^- 的运动也相应于畴壁运动,在畴壁左边的所有质子是处在左势阱中,在它右边的所有质子则处在右势阱中,如图 8.29(a) 与图 8.29(b) 所示。电荷在冰晶格中的传递,就是相应于这些正与负离子缺陷 H_3O^+ 和 OH^- 在晶格中沿相反方向的迁移。显然它们是 H_2O 分子在一定条件下分解出来的质子从一个水分子向邻近水分子的传递或跳跃产生的。人们最早就是利用这个机制来解释氢键系统中反常质子传递的。此时链中所有质子同时向一个方向的跳跃,在宏观上就出现沿链方向的宏观质子的导电性,这叫做 Grotthus 或跳跃机制。在这种机制下的质子位移将由质子所产生的弹性势能来控制。

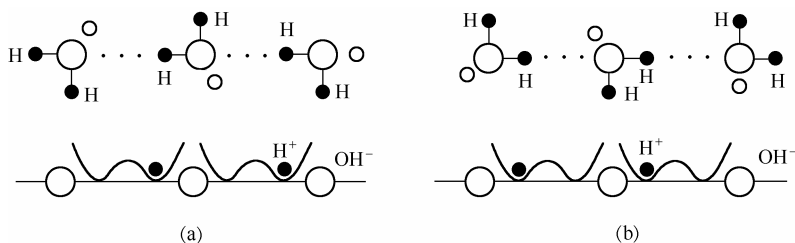


图 8.27 氢键系统中的双阱势

但是当质子通过这种机制从一端运动到接近分子链的另一端点处时,质子可与氧原子形成一个共价键,同时游离出一个质子。但要使这个传递继续下去,则不得不改变这个共价键的方向,恢复到原来的状态,于是才有质子的继续传递。这种共价键方向的转动称为键的重新定向,如图 8.29(c) 和(d) 所示,从而出现键或 Bjerrum 缺陷。它既可以在键中发生,也可以在键端发生。由这类缺陷也会导致具有正、负

电荷携带者的 D 和 L 缺陷的出现，并沿链的相反方向传递。而氢键系统中的质子导电恰好是这两种缺陷的运动和相互作用与相互转换实现的。这就是氢键系统反常质子导电的物理形式及机制。

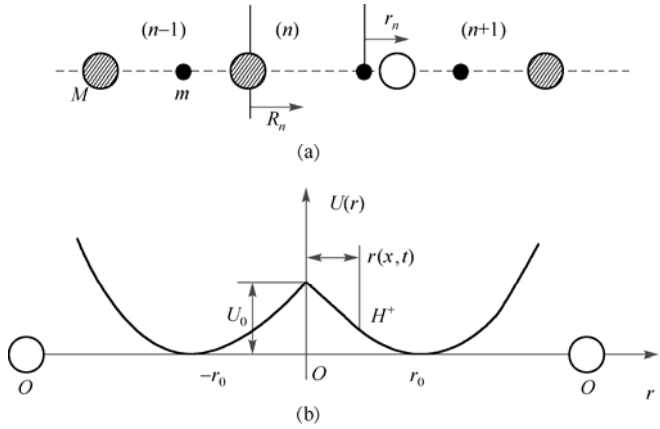


图 8.28 在氢键系统中的质子运动的模型

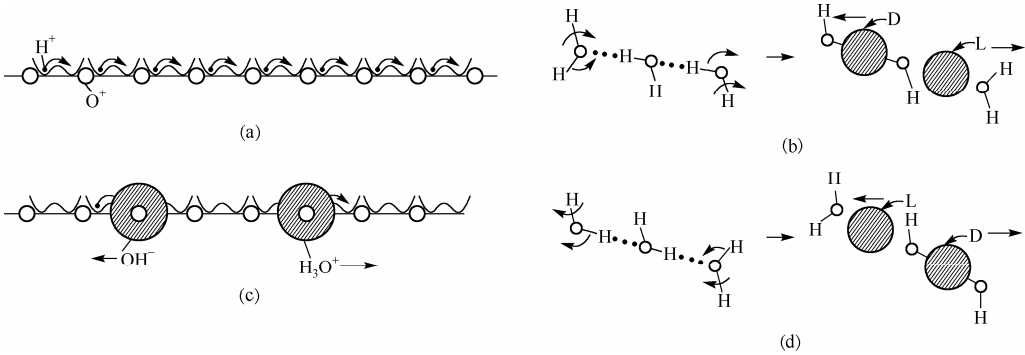


图 8.29 在系统中由质子运动引起的两种缺陷形式

8.7.2 氢键系统中质子的传递理论

可以肯定，氢键系统中质子的传递是一个非线性问题，这是由于氢键系统本身就是一个非线性系统。以冰晶体为例，要把具有正四面体氢键网络体系选定一个质子形成一个氢键分子链结构，除了受非线性作用力的影响外，别无其他办法。显然，在正常情况下，处于双阱势中的质子受到邻近重离子的弹性力的作用后以最小势能点作为平衡位置而做谐振动。但要使质子从双阱势的一个势阱穿过势垒跳跃到另一个势阱中，必须受到双阱势场和相邻质子与质子之间的偶极-偶极及共振等相互作用。因此，在此系统中一个质子至少受到共价键的弹性力、两相邻 X 原子对它产生的双阱势，以及相邻氢原子的电子云畸变产生的电偶极-偶极相互作用。Antonchenko, Davydov

和Zolotariak等人对此建立的第一个非线性(ADZ)理论中,将质子的哈密顿函数表示为

$$H = H_p + H_{ph} + H_{int} = \sum_n \left\{ \frac{m}{2} \left[\dot{R}_n^2 + \omega^2 (R_{n+1} - R_n)^2 \right] + U(R_n) \right\} + \sum_n \left\{ \frac{M}{2} \left[\dot{u}_n^2 + \Omega_0^2 u_n^2 + \Omega_1^2 (u_{n+1} - u_n)^2 \right] \right\} + \sum_n \chi u_n (R_n^2 - R_0^2) \quad (8.81)$$

式中, R_n 和 u_n 分别是质子和重离子的位移算符; m 和 M 是质子和重离子的质量; ω

和 Ω_0 是它们的谐振频率; Ω_1 是重离子的非对角矩阵元, 它与相邻的偶极-偶极相互

作用有关。 r_0 是分子链的晶格常数, 其中 H_p 描述的是将质子看成是处于双阱势中的一个低频声学振子模型; H_{ph} 描述的是 X 原子或 OH^- 离子的一个低频光学和声学“混合”振子模型; H_{int} 表示了因质子的位移、跳跃等导致的 X 原子的位置改变和状态变化。 χ 是质子与重离子 X 或 OH^- 之间的耦合常数。

质子传递一直是人们关注的问题, 尽管有上述理论模型, 但仍未解决根本问题。研究表明在上述 ADZ 模型中, 质子形成的孤子态的束缚能过小, 致使孤子态的稳定性差, 特别是在室温下的热稳定性极差。即使在连续性近似下, 此模型也很难求解, 一个真正的解析解不可能得到。另外, 若使用系统的现实参量值去估计所得解的适用范围时, 它与晶格空间相比太窄, 以至于连续性近似失效。在冰分子情况下, 缺陷 H_3O^+ 和 OH^- 几乎变成了点缺陷。这些表明该模型未能正确表示出氢键系统的本质特性, 因此需要改进和发展。改进的办法是找出这些模型本身即模型哈密顿量的不足。虽然有不同类型的理论模型先后提出, 但都遇到了不同程度的困难。仔细分析不难发现在 ADZ 模型和改进模型中, 所形成的质子-孤子传递的非线性作用, 基本上来源于双阱势。在质子与重离子晶格之间的耦合相互作用主要是降低质子移动要“越过”的势垒的高度, 但对形成孤子的非线性作用的贡献极小。于是便使形成的质子-孤子基本上仅能解释离子缺陷, 而不能解释键缺陷。同时, 也不可能解释在系统中出现质子的集体激发和质子大极化。这表明不但要考虑由质子的位移引起的两个相邻离子的位置的改变所产生的相互作用, 而且还要考虑相邻两个质子之间电磁相互作用所导致的相邻重离子的状态或位置改变所产生的相互作用。这些相互作用不但导致了质子间的相关作用和质子传递, 同时也贡献了一种非线性作用, 使形成的孤子的束缚能增大, 稳定性增强。所得的解可能统一解释两类缺陷的运动和相

互转变,为氢键系统中的质子传递给出一个较完整的描述。庞小峰采用了示于图8.28中的一维键状模型,认为其中出现的离子和键缺陷都是氢离子和重离子之间的相对位置发生改变产生的。而离子缺陷仅是质子越过键间势垒从一个重离子移动到另一个重离子产生的;键缺陷是质子越过键内势垒,从重离子的一边向另一边移动产生的。

因此,质子在这个氢键系统中运动不但要克服或穿过在键内的双阱势的势垒,也要克服由质子与相邻重离子(OH^-)之间的电磁相互作用所造成的在键间的、处于重离子中心处的势垒。这表明,质子除了受到对称的双阱势的作用,还受到另外质子和重离子间的电磁相互作用。若采用一个振子模型来描述在氢键系统中质子的运动状态及其质子传递的特征,庞小峰将氢键系统的哈密顿量重新表示为

$$\begin{aligned}
 H = H_p + H_h + H_{\text{int}} = & \left\{ \sum_n \left[\frac{1}{2} m \dot{R}_n^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 R_n^2 - \frac{1}{2} m \omega_1^2 R_n R_{n+1} + U_0 \left(1 - \left(\frac{R_n}{R_0} \right)^2 \right)^2 \right] \right\} + \\
 & \left\{ \sum_n \left[\frac{1}{2} M \dot{u}_n^2 + \frac{1}{2} W (u_n - u_{n-1})^2 \right] \right\} + \\
 & \left\{ \sum_n \frac{1}{2} m \chi_1 (u_{n+1} - u_{n-1}) R_n^2 + m \chi_2 (u_{n+1} - u_n) R_n R_{n+1} \right\} \quad (8.82)
 \end{aligned}$$

式中,质子坐标 R_n 是氢原子从第 n 个与第 $(n+1)$ 个重离子之间的中点开始计起的位移;

R_0 是双阱势的最大值势垒与最小值(势阱底)间的距离; m 是质子的质量;

$U(R_n) = U_0 \cdot \left[1 - (R_n/R_0)^2 \right]^2$ 是质子受到的双阱势; ω_0 和 ω_1 是质子的动力学矩阵元的对角和非对角元部分; ω_0 也是质子谐振动的 Einstein 频率; $\frac{1}{2} m \omega_1^2 R_i R_{i+1}$ 表示了两个相邻氢原子之间的偶极-偶极相互作用产生的强相关联效应; U_0 是双阱势的势垒高度; M 是重负离子或 OH^- 或原子团的质量; W 是重离子子晶格的弹性系数; $v_0 = r_0 (W/M)^{1/2}$ 是它的声速; r_0 是两重离子间的距离; $2\chi_1 = \partial \omega_0^2 / \partial u_n$ 和 $2\chi_2 = \partial \omega_1^2 / \partial u_n$ 分别表示由重离子子晶格的单位伸长所引起的质子振动能量和两相邻质子之间相互作用能的变化。 H_p 表示了质子子晶格的哈密顿量, H_h 是重离子子晶格做谐振运动的哈密顿量, H_{int} 刚好表示由质子的位移引起的相邻重离子的相对位移及两相邻质子间的关联作用所导致的两相邻重离子的相对位移所引起的相互作用哈密顿量。此模型

的基本思想是质子的振动频率 ω_0 和 ω_1 与重离子的位移 u_n 相关。显然，它与 ADZ 模型的哈密顿量式 (8.81) 明显不同，在庞小峰的模型中质子是具有光学支的振子模型，重离子是一个声学支振子模型，它们之间的相互作用的表示也具有明显的物理意义，但 ADZ 模型不完全是这样。

现首先研究质子运动的特点。在一维情况下，从哈密顿方程式 (4.35) 可得

$$m\ddot{R}_n = -\frac{\partial H}{\partial R_n} = -m\omega_0^2 R_n + \frac{1}{2}m\omega_1^2 (R_{n+1} - R_{n-1}) + 4U_0 R_0^{-2} \left(1 - (R_n/R_0)^2\right) R_n - m\chi_1 (u_{n+1} - u_{n-1}) R_n - m\chi_2 [(u_{n+1} - u_n) R_{n+1} + (u_n - u_{n-1}) R_{n-1}] \quad (8.83)$$

$$M\ddot{u}_n = -\frac{\delta}{\delta u_n} H = W(u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \frac{1}{2}m\chi_1 (R_{n+1}^2 - R_{n-1}^2) + m\chi_2 (R_n R_{n+1} - R_n R_{n-1}) \quad (8.84)$$

采用连续性近似, 则式(8.83)~式(8.84)分别变为

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} R(x, t) = m(\omega_1^2 - \omega_0^2) R(x, t) + \frac{1}{2} m r_0^2 \omega_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x, t) + \frac{4U_0}{R_0^2} \left(1 - \left(\frac{R(x, t)}{R_0}\right)^2\right) R(x, t) - 2m(\chi_1 + \chi_2) r_0 \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} R(x, t) \quad (8.85)$$

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = W r_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + 2(\chi_1 + \chi_2) m r_0 R(x, t) \frac{\partial}{\partial x} R(x, t) \quad (8.86)$$

设 $\xi = x - vt$, 则式(8.86)有解

$$\frac{\partial}{\partial \xi} u(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} u(x, t) = -\frac{m r_0 (\chi_1 + \chi_2)}{M v_0^2 (1 - s^2)} R^2(x, t) + g, \quad (s = v/v_0) \quad (8.87)$$

式中, g 是非确定的积分常数。将式(8.87)代入式(8.85), 可得

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t^2} R(x, t) - v_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} R(x, t) - [\omega_1^2 - \omega_0^2 + 2g(\chi_1 + \chi_2)] R(x, t) - \frac{4U_0}{m R_0^4} [R_0^2 - R^2(x, t)] \times \\ R(x, t) - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m r_0^2}{M v_0^2 (1 - s^2)} R^2(x, t) R(x, t) = 0 \left(v_1^2 = \frac{1}{2} \omega_1^2 r_0^2 \right) \end{aligned} \quad (8.88)$$

式(8.88)就是氢键系统中在这种情况下质子运动的方程。由此看到, 质子与重离子之间的相互作用不但降低了势垒的高度, 同时为形成孤子所需要的非线性作用也做出了重要贡献, 即这时的非线性作用不但来源于双阱势, 也来源于质子与重离子之间的耦合相互作用。

$$\text{如果让 } \varepsilon = \omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{4U_0}{m R_0^2} + 2g(\chi_1 + \chi_2), \quad G = \frac{4U_0}{m R_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m r_0^2}{M v_0^2 (1 - s^2)} \quad (8.89)$$

则式(8.89)变成

$$R_{tt}(x, t) - v_1^2 R_{xx}(x, t) - \varepsilon R(x, t) + G R^2(x, t) R(x, t) = 0 \quad (8.90)$$

当 $\varepsilon > 0, G > 0$, 即当

$$\frac{1}{mR_0^4} \left[U_0 - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m^2 r_0^2 R_0^4}{Mv_0^2(1-s^2)} \right] > 0, \quad \omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{U_0}{mR_0^2} - 2g(\chi_1 + \chi_2) > 0$$

$$\text{和} \quad 0 < v < v_1, \quad \varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2 > 0, \quad 0 < v < v_0 \quad (8.91)$$

则式(8.90)的解具有如下形式:

$$R(x, t) = \pm \left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{G} \right)^{1/2} \tanh \left(\left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{2(v_1^2 - v^2)} \right)^{1/2} (x - vt) \right) e^{i(kx - \omega t)} \quad (8.92)$$

这是一个拓扑性的扭结孤子, 从式(8.87)和式(8.92)可得

$$u_\xi(x, t) = \frac{(\chi_1 + \chi_2)mr_0}{mv_0^2(1-s^2)} \left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{G} \right)^{1/2} \operatorname{sech}^2 \left(\left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{2(v_1^2 - v^2)} \right)^{1/2} (x - vt) \right)$$

则式(8.86)的解

$$u(x, t) = \mp \frac{\sqrt{2}(\chi_1 + \chi_2)mu_o}{Mv_0^2(1-s^2)G} \left[\frac{(\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2)}{(v_1^2 - v^2)^{-1}} \right]^{1/2} \tanh \left(\left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{2(v_1^2 - v^2)} \right)^{1/2} (x - vt) \right) \quad (8.93)$$

$$\text{这里选择了} \quad g = \frac{ml(\chi_1 + \chi_2)}{Mv_0^2(1-s^2)G} R_0^2, \quad R_0^2 = \left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{G} \right)$$

式(8.93)也是一类拓扑性的扭结孤子。

当 $\varepsilon < 0$, $G < 0$ 时, 即

$$\omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{U_0}{mR_0^2} < 0, \quad \frac{1}{mR_0^4} \left[\frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m^2 r_0^2 R_0^4}{Mr_0^2(1-s^2)} - U_0 \right] > 0 \quad (8.94)$$

和 $0 < v < v_0$, $0 < v < v_1$, $\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2 < 0$ 时, 式(8.86)和式(8.90)的解为

$$R(x, t) = \pm \left(\frac{2|\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2|}{|G|} \right)^{1/2} \operatorname{sech} \left[\left(\frac{|\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2|}{v_1^2 - v^2} \right)^{1/2} (x - vt) \right] e^{i(kx - \omega t)} \quad (8.95)$$

$$u(x, t) = \mp \frac{2(\chi_1 + \chi_2)mr_0 \left[(k^2 v_1^2 - \omega^2 - \varepsilon) \right]^{1/2}}{Mv_0^2(1-s^2)|G|(v_1^2 - v^2)^{-1}} \times \tanh \left\{ \left(\frac{|\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2|}{v_1^2 - v^2} \right)^{1/2} (x - vt) \right\} \quad (8.96)$$

这是拓扑性的扭结孤子解。注意, 在这里选择了积分常数 $g=0$ 。

在以上的研究中,我们把氢键系统中所包含的质子子晶格和重离子(或 OH)子晶格都以相同的物理观点进行了处理,也就是既认为质子在以它本来的面貌进行运动,也认为重离子按照自己的特点做振动。由于它们之间的相关,组成了整个系统。考虑它们之间的相互作用,可以看出不但质子变成孤子局域态,同时重离子也被局域,即由于它们之间的非线性相互作用而使质子和重离子都变成了具有波-粒二象性的孤子态。这就清楚地告诉我们,当考虑系统中不同类型粒子的固有运动和它们之间的相互作用时,便有非线性作用出现。此时,微观粒子自然具有了波-粒二象性而被局域。如果再考虑质子和重离子的量子化效应,对它们量子化,则量子化的质子仍会服从非线性 **Schrödinger** 方程而运动。这里不再详细推导,请参阅庞小峰在 **solid.state.phys.B** 上的文章。

现在计算孤子的物理量。对于由式(8.90)所描述的孤子能量为

$$E = \frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{+\infty} H dx = \frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{+\infty} m \left(\frac{1}{2} R_t^2 + \frac{1}{2} v_1^2 R_x^2 - \frac{1}{2} \varepsilon R^2 + \frac{1}{4} G R^4 \right) dx \quad (8.97)$$

若将式(8.92)的孤子解代入上式,当 v 很小时,可得

$$E = E_0 + \frac{1}{2} M_{\text{sol}} v^2 \quad (8.98)$$

式中,

$$E_0 = \frac{m(\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2)}{2G} \left\{ \left(\omega^2 + k^2 v_1^2 - \varepsilon \right) \left[1 - \left(\frac{2v_1}{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2} \right)^{1/2} \right] - \right. \\ \left. (\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2) \times \left[\frac{1}{2} - \frac{2}{3} \left(\frac{2v_1}{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2} \right)^{1/2} \right] + \frac{2v_1}{3} \left(\frac{\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2}{2} \right)^{1/2} \right\} \quad (8.99)$$

这是孤子的静止能量, M_{sol} 是孤子的质量

$$M_{\text{sol}} = \frac{m(\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2)^{1/2} (\omega^2 + k^2 v_1^2 - \varepsilon)}{\sqrt{2} v_1 \left[U_0 / m R_0^4 - 2(\chi_1 + \chi_2)^2 m r_0^2 / (M v_0^2 (1 - s^2)) \right]} = \text{constant} \quad (8.100)$$

从式(8.98)和式(8.100)可以看出,在孤子运动速度较小时,它类似于经典粒子的特性。

孤子的动量 $P_k = -\frac{m}{u_0} \int_{-\infty}^{+\infty} R_x R_t dx$, 在式(8.92)下可得

$$\begin{aligned}
 P_k &= m^* v; \quad m^* = 2\sqrt{2} \left[\frac{U_0}{R_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)r_0^2 m^2}{Mv_0^2(1-s^2)} \right]^{1/2} \bigg/ \left[3r_0 G[m(v_1^2 - v^2)]^{1/2} \right. \\
 &= \frac{2\sqrt{2}m}{3r_0(v_1^2 - v^2)^{1/2}} \left[\frac{U_0}{R_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)r_0^2 m^2}{Mv_0^2(1-s^2)} \right]^{1/2} \quad (8.101)
 \end{aligned}$$

式中, m^* 是扭结孤子的有效质量。对于式(8.92)的扭结孤子的宽度为

$$W_k = \pi r_0 \left[\frac{\omega_0^2 - \omega_1^2 + k^2 v_1^2 - \omega^2 + \left[\frac{U_0}{mR_0^2} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 r_0^2 m R_0^2}{Mv_0^2(1-s^2)} \right]}{v_1^2 - v^2} \right]^{-1/2} \quad (8.102)$$

很明显, W_k 是依赖于质子的特性、势垒的高度、质子-质子相互作用和质子-重离子间的相互作用常数。 W_k 可以作为孤子理论中连续性近似正确程度的量度, 只有在 $W_k \ll r_0$ 时连续性近似才适用。显然, 此模型是满足的。

孤子的能量依赖于孤子的速度 v 和耦合强度 $(\chi_1 + \chi_2)$ 以及双阱势的势垒高度 U_0 等系统的固有特征。如果知道这些参数值, 就可求出孤子能量与这些量之间的关系。对于像蛋白质的氢键系统, 常采用 $R_0 = 0.1 \text{ nm}$, $r_0 = 0.5 \text{ nm}$, $U_0 = 1 \text{ eV}$, $M = 100 m_p$, $m = m_p$, $v_1 = (1.8 \sim 2.2) \times 10^3 \text{ m/s}$, $c_0 = (0.8 \sim 1) \times 10^4 \text{ m/s}$, $\chi_1 = (1.5 \sim 1.9) \times 10^{37} / \text{ms}^2$, $\chi_2 = (0.29 \sim 0.33) \times 10^{37} / \text{ms}^2$ 。可求出随速度增加孤子能量的增加。同时随 $(\chi_1 + \chi_2)$ 的增加, 孤子的能量也迅速增加。这一结果有力地说明通过质子的自陷, 质子能从重离子的一边移动到另一边, 即共价键的转动和键缺陷的产生机制问题。

一般来讲, 当系统无缺陷时系统是中性的。当有缺陷时, 孤子携带有电荷, 其电荷值依赖于缺陷偏离正常质子电荷分布的程度, 即孤子电荷依赖 $a = R(\infty) - R(-\infty)$ 。

对于正-负离子缺陷 $a = \pm 2R_0$, 对于 D, L 型 Bierrum 键缺陷, $a = \pm(4\pi - 2R_0)$ 。在质子传递中, 离子和键缺陷都存在, 所以孤子的电荷为 $q = e_i + e_b$, e_i 和 e_b 分别是离子和键缺陷的电荷。按照拓扑性扭结孤子电荷的定义和 Pneumatikos 的结果, 可得 $e_k = -d_k a_k$ ($k = i, b$), 当 $d_i = d_b = d$ 时其比例系数 $d = e/4\pi$ 。在大多数实际情况下 $d_i \neq d_b$ 。而 e_k 强烈依赖于负重离子的动力学特征。负重离子晶格的伸长或压缩不但可以调剂势场的最小值间的间距, 而且可改变势垒的高度, 当然也可以改变孤子的电荷值。在冰中测量 $e_i = 0.68e$, $e_b = 0.32e$ 。

8.8 质子的非线性激发的运动特点

8.8.1 系统中的扭结对孤子态的产生

现在来研究氢键系统中形成的质子的孤子态的运动造成的物理效应。由式(8.92)～式(8.93)可知,一旦在质子子晶格中产生了自局域的扭结(Kink)孤子,则在重离子子晶格中也相应出现自局域的反扭结(antiKink)孤子,它是扭结孤子的影子。则这个扭结与反扭结构成一个扭结对,它们一起以相同的速度在氢键链中传播,如图 8.30 所示。对于式(8.92)和式(8.93)所表示的扭结孤子对的动量为

$$P = -\frac{1}{u_0} \int (mR_x R_t + Mu_t u_x) dx = P_x + P_{ak} = M_{sol}^* v \quad (8.103)$$

式中, P_k 是质子扭结孤子的动量; P_{ak} 是重离子反扭结孤子的动量,

$$P_{ak} = \frac{M}{u_0} \int u_t u_x dx = M^* v; \quad M_{sol}^* = M^* + m^*$$

$$M^* = 2\sqrt{2}MQ^2\tilde{h}^{3/2}/3r_0b; \quad h = \left[U_0/R_0^4 - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 r_0^2 m^2}{Mv_0^2(1-s^2)} \right] / m(v_1^2 - v^2)$$

$$b = \frac{G}{(v_1^2 - v^2)}; \quad Q = (\chi_1 + \chi_2)^2 mr/Mv_0^2(1-s^2); \quad m^* = 2\sqrt{2}m\tilde{h}^{3/2}/3r_0$$

M^* 和 m^* 分别是重离子反扭结和质子扭结孤子的有效质量。

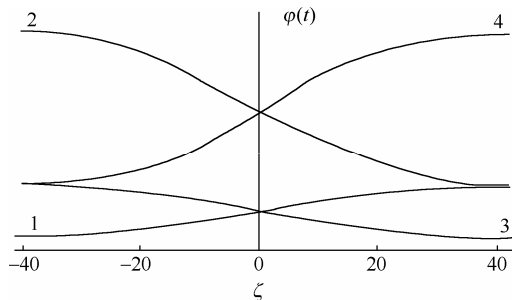


图 8.30 在氢键系统中出现的 Kink-antiKink 对孤子态

现在来分析该系统的势能分布的特点。由式(8.88)可得下面的系统的有效哈密顿量:

$$H = \int m \left[\frac{1}{2} R_t^2 + \frac{1}{2} R_x^2 + U(R) \right] dx \quad (8.104)$$

其中有效相互作用势函数为

$$U(R) = -\frac{1}{2}m\varepsilon R^2 - \frac{1}{4}GmR^4 + U_0 \quad (8.105)$$

在式(8.104)中的第一项为动能, 第二项是线性相互作用能, 第三项表示由双阱势和质子-重离子相互作用导致的系统的 R^4 型非线性势能。为了寻找不变波形和常速 v 运动的解, 常设 $\xi = x - vt$, 则可得到第一个运动积分

$$\frac{1}{2}(v^2 - 1)(R_\xi^2) = U - U_0 \quad (8.106)$$

U_0 是积分常数, 也是双阱势的势垒高度。由式(8.104)和式(8.106)的哈密顿量所决定的孤子性质主要依赖于势 $U(R)$ 的特性。 $U(R)$ 的特性主要由 ε 和 G 的大小和符号来决定。因此, ε 和 G 的性质决定该体系的孤子的特性。由式(8.89)可知, 在此模型中的非线性作用 G 是由两种符号相反的作用, 即双阱势和质子与重离子之间的非线性耦合作用组成的。而线性作用 ε 是由质子的非对角和对角线性作用, 即双阱势和耦合作用的线性部分组成。由此, 分下面几种情况来讨论。

8.8.2 离子缺陷运动的特点

当 $\varepsilon > 0$ 和 $G > 0$ 时, 由式(8.87)可知由于双阱势大于非线性耦合作用, 所以此时出现的孤子的性质主要由双阱势来决定的。耦合作用仅起次要作用, 具体来讲, 它仅起降低双阱势的势垒高度的作用, 使质子易跳过势垒从一个阱向另一个阱运动, 这与ADZ模型相同。在此情况下系统的势具有最小值为

$$U_{\min} = -\left(\frac{\varepsilon^2 m}{2G}\right) + U_0 = -\frac{m}{4} \left[\frac{\left(\omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{4U_0}{MR_0^2} - 2g(\chi_1 + \chi_2)l\right)^2}{\frac{4U_0}{MR_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 mr_0^2}{Mv_0^2(1-s^2)}} \right] + U_0 \quad (8.107)$$

相对应的两个简并基态的位置在

$$\begin{aligned} \tilde{R}_0 &= \pm \left(\frac{\varepsilon}{G}\right)^{\frac{1}{2}} \\ &= \pm \left\{ \left[\left(\omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{4U_0}{MR_0^2} - 2g(\chi_1 + \chi_2)r_0 \right) \right] / \left[\frac{4U_0}{MR_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 mr_0^2}{Mv_0^2(1-s^2)} \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (8.108)$$

由此可知, U_{\min} 和它的位置 \tilde{R}_0 和势垒高度 \bar{U}_0^* 直接依赖于比值 ε/G , 或依赖于

$(\chi_1 + \chi_2)$, ω_0 , ω_1 , ν 和 U_0 。当 $\chi_1 = \chi_2 = 0$, $\omega_1 = \omega_2 = 0$ 时, $U_{\min} = 0$, $R = R_0$, 这恰好是原始双阱势的情况。但当 $\chi_1 \neq 0$ 和 $\chi_2 \neq 0$, $\omega_1 \neq 0$ 和 $\omega_2 \neq 0$ 时, 情况就变得十分复杂。很明显, 在 $\varepsilon/G < 1$, $=1$ 和 >1 三种情况下, $U(R)$ 的形状是不同的, 势垒高度 \bar{U}_0^* 和最小值位置 \tilde{R}_0 随 ε 的增加和 G 的减少而增加。同时, 在 $(\chi_1 + \chi_2)$ 增加时, \bar{U}_0^* 减少, 而相对于重离子位置定义的势能最小值的位置 \tilde{R}_0 也被拉长, 这意味着质子跃过势垒的概率随耦合作用的增加而增强。在这种情况下, \bar{U}_0^* 和 \tilde{R}_0 的减少特性可表示为

$$\Delta U_0 = U_0 - U_0 \left[1 + (2z - z^2)(y + 1) + y \right] = U_0 \left[(z^2 - 2z)(y + 1) - y \right] > 0 \quad (8.109)$$

$$\Delta \tilde{R}_0 = R_0 - R_0 \left(1 - \frac{z}{2} \right) \left(1 + \frac{y}{2} \right) = R_0 \left[\frac{z}{2} \left(1 + \frac{y}{2} \right) - \frac{y}{2} \right] > 0 \quad (8.110)$$

这里, $1 < z = \frac{\omega_0^2 - \omega_1^2 + 2g(\chi_1 + \chi_2)l}{4U_0/MR_0^2}$, $0 < y = \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m^2 r_0^2 R_0^4}{4U_0 M v_0^2 (1 - s^2)}$, $y < z$

式(8.109)和式(8.110)清楚地表明 ΔU_0 和 $\Delta \tilde{R}_0$ 随 $(\chi_1 + \chi_2)$ 的增加而增加。在这同时, 势能的极小值的大小从 $R = R_0$ 的零值变成在 $\tilde{R}_0 < R_0$ 时的负值。于是可得出, 越大的 $(\chi_1 + \chi_2)$, \tilde{R}_0 的值越小, 势垒的高度越小, 势能的最小值会逐渐由零变到负值。这意味着质子跳过势垒的概率随 $(\chi_1 + \chi_2)$ 的增加会越来越加大, 因此 $\varepsilon > 0$ 和 $G > 0$ 的情况表示了质子渡越双阱势的势垒的运动, 后者导致了离子缺陷。因此, $\varepsilon > 0$ 和 $G > 0$ 以及相应的孤子解式(8.92)~式(8.93)描述了离子缺陷的存在与传递。

另外, U_{\min} 和 \tilde{R}_0 也随孤子速度的增加而减少, 这表明质子的速度增加会使它越来越远离重离子, 从而促使离子缺陷的形成与运动。

8.8.3 键缺陷运动的特点

当 $\varepsilon < 0$ 和 $G < 0$ 时, 刚好与前一种情况相反, 即这时耦合作用大于双阱势的作用, 于是所形成的性质主要是由非线性耦合作用决定的, 双阱势仅起次要作用。此时, 系统仍是二度简并的, 其势能最小值是负的, 即

$$U'_{\min} = \frac{m|\varepsilon|^2}{4|G|} - U_0 = \frac{m}{4} |\tilde{R}_0'^2 \varepsilon| - U_0 < 0 \quad (8.111)$$

它的相应位置在 $\tilde{R}_0' = \pm \left(\frac{|\varepsilon|}{|G|} \right)^{1/2} = \pm \left(\frac{\varepsilon'}{G'} \right)^{1/2} \quad (\varepsilon' = -\varepsilon, G' = -G) \quad (8.112)$

从式(8.111)~式(8.112)可知, 当 ε 很小和 G 很大时, \tilde{R}_0' 增大, U_{\min} 变小。非常

明显, U'_{\min} 和 \tilde{R}'_0 依赖于 $(\chi_1 + \chi_2)$ 。这种关系可解析表示为

$$\tilde{R}'_0 = \pm R_0 \left(1 - \frac{1}{2} z' \right) \left(1 + \frac{1}{2} y' \right), \quad z' = \frac{\omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{4U_0}{MR_0^2}}{2g(\chi_1 + \chi_2)} < 1, \quad y = \frac{1}{y'} < 1 \quad (8.113)$$

和

$$U'_{\min} = \frac{MR_0^4}{4} \left[\frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m r_0^2}{M v_0^2 (1 - s^2)} \right] (1 - z')^2 (1 + y') - U_0 \quad (0 < z', 0 < y', y' > z') \quad (8.114)$$

从式(8.113)可知, 当 $(\chi_1 + \chi_2)$ 增加时, \tilde{R}'_0 增加。这表明强耦合作用可使质子接近于重离子。相反, 当 $(\chi_1 + \chi_2)$ 减少时, \tilde{R}'_0 减少。于是质子远离重离子, 即质子离重离子越远, 则耦合作用减少。因为当质子从左边接近重离子时, 它们的耦合作用增强而可使自陷于重离子构成的势阱中。但当质子速度减少的同时, 由于 \tilde{R}' 减少, 则质子又要远离重离子, 耦合作用也同时减少。于是质子就从左边的势阱位置转换到重离子的另一边的势阱中, 从而使共价键从左边移置于右边, 这正是共价键发生的转动所产生的键缺陷。因此, 这种情况和相应的解式(8.95)和式(8.96)表示了键(Bjerrum)缺陷的运动。

由此可以看出, 由于双阱势和非线性耦合作用之间的相互竞争产生了不同的结果, 从而导致了离子和键等两种不同的缺陷。因此, 用以上解和相应系统的势能的变化可以完满解释氢键系统中两种缺陷的产生机理和运动特性。

当 $\varepsilon > 0$ 与 $G < 0$ 或 $\varepsilon < 0$ 和 $G > 0$ 时, 系统的势能无双简并度。势能只有一个极小值在 $R_0 = 0$ 处, 其值为 $U_{\min}(R) = 0$ 。在此情况下不会产生局域的孤子激发。由此, 使用这个新模型能完整地说明质子的传递。

8.8.4 质子的孤子态的特点

很明显, 质子的传递既可以离子缺陷开始, 也可以键缺陷开始。但在以后, 缺陷的运动必须通过质子的跳跃和价键的转动及它们之间的相互交替变化才能实现。即是说, 质子必须是一个很好的“跨越者”(crossover), 它既能跨过键内势垒, 也能跨过键间势垒, 才能实现永久的质子传导现象。因此, 质子在相邻氢键中的传递是强烈相关的, 其本质就是一种集体效应。于是质子之间的相关作用和质子与重离子间的强烈耦合作用在这一种集体效应中起着重要作用。庞小峰的哈密顿量刚好表现了这些效应和相互作用, 所给出的集体效应导致了这两类缺陷的出现, 得出了拓扑性(或非拓扑性)扭结孤子。这种孤子形态又可以由重离子的振动和它与质子的耦合

强弱来调剂。于是质子的传递便可通过这两类缺陷的交替形成、迁移和消灭过程来实现。

庞小峰的模型的一个最大特点是给出了一个解析解，并可用它来完整地说明质子在氢键系统中的传递。其主要原因是此模型给出了性质不同的两类非线性作用即双阱势和非线性耦合作用，它们之间的竞争和在质子渡越键内势垒和键间势垒时所受到的不同作用造成的。为了说明这一点，首先来研究在式(8.90)、式(8.91)的条件下所得出的解式(8.92)和式(8.93)的物理意义。它们表示了由质子的激发和重离子子晶格的畸变导致的在氢键系统中以相同速度传播的扭结-反扭结对。其中在式(8.92)

的质子-孤子态在 $R(x, t)$ 前取“+”号时表示质子密度的局域性减少(即质子子晶格拉伸而稀释)，相当于负电荷载流子和一个扩展的离子缺陷，以小于声速 v_1 和 v_0 的速度运动。因此这个解相当于在冰分子中的 OH^- 离子缺陷的运动。若 $R(x, t)$ 前取“-”号时，刚好相反，表示质子子晶格的压缩。局域质子密度的局域性增加，相当于产生一个正电荷载流子和扩展的离子缺陷。因此，它是 H_3O^+ 离子缺陷。于是式(8.92)和式(8.93)的解相应于质子在键内的传递，但它们总伴随相邻重离子子晶格的相应结构或构像畸变。而质子与相邻重离子的相互作用仅是降低了双阱势的势垒高度，使质子以孤子形式较容易或加速地穿越势垒。可从式(8.90)和式(8.91)中看出，为了得到这类扭结孤子解，必须满足条件

$$(U_0 - 2g(\chi_1 + \chi_2)mR_0^2) > 0 \quad \text{和} \quad \left(U_0 - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 \mu u_0^2 R_0^4}{Mc_0^2(1-s^2)} \right) > 0$$

这表明质子与重离子之间的耦合作用对孤子的形成和性质的影响是次要的，双阱势才是决定的因素。若这种耦合作用不存在，即 $\chi_1 = \chi_2 = 0$ 时，方程式(8.88)变成

$$R_{tt} - v_1^2 R_{xx} - \varepsilon' R + G' R^2 R = 0 \quad (8.115)$$

这里 $G' = U_0 / mR_0^4 > 0$, $\varepsilon' = \omega_1^2 - \omega_0^2 + U_0 / mR_0^2 > 0$, 它仍然具有与式(8.92)和式(8.93)相同的形式，因而有相同类型的扭结孤子解。因此，可把式(8.92)和式(8.93)的解称为 I 扭结孤子。

但是，当 $0 < v < v_0$, $0 < v_1 < v$, $\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2 < 0$ 和 $\varepsilon < 0$ 及 $G < 0$ 时，从表面上看它仍为扭结孤子解，即

$$R(x, t) = \pm \left(\frac{k^2 v_1^2 - \varepsilon - \omega^2}{\bar{G}} \right)^{1/2} \tanh \left(\left(\frac{k^2 v_1^2 - \varepsilon - \omega^2}{2(v^2 - v_1^2)} \right)^{1/2} (x - vt) \right) e^{i(kx - \omega t)} \quad (8.116)$$

$$\text{这里, } \bar{G} = -G = \frac{1}{mR_0^4} \left[\frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m^2 r_0^2 R_0^4}{Mv_0^2(1-s^2)} - U_0 \right] > 0, \quad \varepsilon' = -\varepsilon, \quad \omega_0^2 > \omega_1^2, \\ \left[\frac{2(\chi_1 + \chi_2)^2 m r_0}{M r_0^2(1-s^2)} - \frac{U_0}{mR_0^2} \right] > 0 \quad (8.117)$$

但它的性质和特征与式(8.92)相比已大大改变。这时孤子的速度 v 满足 $v > v_1 > 0$, 即超声速运动。孤子的频率、波长和静止能量满足 $\varepsilon + \omega^2 - k^2 v_1^2 < 0$ 或 $k^2 v_1^2 - \omega^2 - \varepsilon > 0$, 即频率减小, 波长增加, 振幅改变, 并有 $\omega_0 > \omega_1$ 的特征。而这类孤子的特征和形成主要由质子与重离子之间的耦合作用决定。双阱势的作用也降低到次要的地位, 因为如果 $U_0 = 0$ 时, 方程仍有此类解。但当 $\chi_1 = \chi_2 = 0$ 时, 方程式就不能求得孤子解, 便可证明这一点。该机制是, 质子在接近重离子时由于通过质子-重离子之间的耦合作用, 使质子自陷于重离子的势阱势场中。此时高速向重离子接近的质子靠带负电的重离子的电荷吸引力使其自己的平衡位置靠近于重离子并从两个平衡位置中的一个跃迁到另一个, 此时形成的自陷态速度再次减慢。这又使它与重离子的耦合减弱, 促使自己的平衡位置远离重离子而向前运动, 于是使质子从一边迁移到了另一边, 实现了共价键的转换。因此, 式(8.116)的解不表示质子在键内传递的离子缺陷, 而是表示质子在键间渡越所产生的 Bjerrum 缺陷, 于是 X-H 键转动。所产生的具有两个质子和正有效电荷的 X-X 键 [即 D 缺陷, 相应于 $R(x, t)$ 前取负号] 和没有质子,

具有负电荷的 L 缺陷 [相应于 $R(x, t)$ 前取正号], 即它们相当质子的注入、迁移或移走产生的质子数的增加与减少。这里称为 II 扭结孤子。

于是庞小峰的理论能给出两类性质不同的扭结解析解。它们分别相应于氢键系统中在不同情况下的质子传递引起的两类不同缺陷, 即 I 扭结 $\rightarrow \Gamma^-$ 离子缺陷; II 扭结 $\rightarrow \text{L Bjerrum}$ 缺陷。反 I 扭结 $\rightarrow \Gamma^+$ 离子缺陷; 反 II 扭结 $\rightarrow \text{D Bjerrum}$ 缺陷。

式(8.95)和式(8.96)也描述质子和重离子晶格的畸变沿氢键系统的传播。其主要是由质子与重离子晶格耦合作用引起的质子渡越键间势垒, 它等值于 X-H 键转动产生的正(或 D)和负(或 L)Bjerrum 缺陷的运动和特征。如果 $0 < v < v_0$, $0 < v_1 < v$, $\varepsilon - \omega^2 - k^2 v_1^2 > 0$, $\varepsilon > 0$ 和 $G > 0$ 时也有类似于式(8.95)和式(8.96)的解。它描述了主要由双阱势引起的质子穿越键内势垒的跳跃运动所产生的正(Γ^+)和负(Γ^-)离子缺陷的运动和特征。

但到底这个系统中的质子以何种类的孤子沿氢键系统传播, 主要决定于氢键系

统所处的环境条件和边界条件(即 g 是否等于零)。也就是不同的氢键系统, 由于所处的环境和边界条件不同, 可以不同类型的孤子在氢键系统中传播。不管用任何机制传递, 庞小峰的理论都能完整地解释质子在氢键系统中的传递。

8.9 系统特性的变化和环境因素对质子的孤子态的影响

8.9.1 重离子的非简谐运动

前面的研究仅考虑了重离子的简谐振动。实际上系统是处在有限温度的状态中, 这会使重离子子晶格热膨胀, 于是应考虑重离子的非简谐振动。在此情况下, 庞小峰模型的哈密顿量即式(8.82)中的 H 应变成

$$\begin{aligned}\bar{H} &= H_p + H_h + H_{\text{int}} \\ &= H_p + \sum_n \left[\frac{1}{2} M \dot{u}_n^2 + \frac{1}{2} W (u_n - u_{n-1})^2 + \frac{1}{3} k_1 (u_n - u_{n-1})^3 \right] + H_{\text{int}}\end{aligned}\quad (8.118)$$

这里 k_1 是非线性弹性常数。用前面的方法在连续性近似下可得

$$R_u - v_1^2 R_{xx} - \varepsilon R + GR^3 - \gamma R^5 = 0 \quad (8.119)$$

这里, $\varepsilon = \omega_1^2 - \omega_0^2 + \frac{4U_0}{mR_0^2}$, $G = \frac{4U_0}{mR_0^4} - \frac{2(\chi_1 + \chi_2)mr_0^2}{Mv_0^2(1-s^2)}$, $v_1^2 = \frac{1}{2}\omega_1^2 r_0^2$, $v_0^2 = r_0^2(W/M)$,

$\gamma = k_1 m^2 (\chi_1 + \chi_2)^3 r_0^5 / 2 [Mv_0^3(1-s^2)]^3 > 0$ 。阎循领和庞小峰求出了从 Z_1 开始又接近于 Z_2 的解和相反情况的解, 这里 $R = \alpha Z$, $t = \gamma_1 T$, $x = kX$, 其中 $\alpha = \sqrt{G/\gamma}$, $\gamma_1 = \sqrt{\gamma}/G$, $k = v\sqrt{\gamma}/G$ ($\gamma > 0, G > 0$) 和 $A = \varepsilon\gamma_1^2$ 。

(a) 在 $Z_1 = Z_2 = 0$ 时的第 I 类解(脉冲)。在此条件下从式(8.119)可求出其解为

$$Z = Z_m / \left[1 + P \sinh^2(\Omega\xi/2) \right]^{1/2}$$

这里, $Z_m^2 = \pm 4A / (\sqrt{1-A/A_0} \pm 1)$ 和 $P = 2\sqrt{1-A/A_0} / (\sqrt{1-A/A_0} \pm 1)$ 。

上式中的“+”号相应于超声孤波解($v > 1$)、其条件为 $0 < A < A_0$; 其“-”号相应于次声孤波解($v < 1$)、其条件是 $A < 0$ 。这里 $A_0 = 3/16$, 而 $\Omega^2 = 4A/(v^2 - 1)$ 。

(b) 在 $Z_1 = Z_0$, $Z_2 = -Z_0$ 条件下, 存在的第 II 类 Kink 孤子解, 其表示为

$$Z = \frac{\pm Z_0 \tanh Y}{\left[1 + P(1 - \tanh^2 Y)\right]^{1/2}}$$

这里, $Y = \frac{1}{2}\Omega\xi$, $P = Z_0^2 / \left(2Z_0^2 - \frac{1}{2}\right)$, $\Omega^2 = 4Z_0^2 \left(Z_0^2 - \frac{1}{2}\right) / (v^2 - 1)$

其中 $(Z_0^\pm)^2 = (1 \pm \sqrt{1 - 4A})/2$ 。在条件 $A < 3/16$ 和 $A \neq 0$ 时, “+” 号表示超声 Kink 解, “-” 号表示次声 Kink 解, (此时 $A < 1/4, A \neq 0, A \neq 15/64$)。

(c) 在 $Z_1 = Z_2 \neq 0$ 时, 存在第Ⅲ类解, 它可表示成

$$Z = \pm \frac{Z_0}{\left[(P+1)\tanh^2 Y - P\right]^{1/2}}$$

这里, $P = Z_0^2 / \left(2Z_0^2 - \frac{1}{2}\right)$, $\Omega^2 = 4Z_0^2 \left(Z_0^2 - \frac{1}{2}\right) / (v^2 - 1)$

而 $(Z_0^\pm)^2 = (1 \pm \sqrt{1 - 4A})/2$ 。在 $3/16 < A < 1/4$ 的条件下有超声孤波解(即“+”号)。

(d) 当 $a = 3/16$ 时存在第Ⅳ类解, 它表示从态 $Z_1 \neq 0$ 到态 $Z_2 = 0$ 的跃迁, 这时仅存在 $v > 1$ 的超声孤波解

$$Z = \pm \frac{1}{\left[k_2 \exp(\pm \Omega\xi) + 4/s\right]^{1/2}}, \quad \left(\Omega = \frac{1}{2} \left[3/(v^2 - 1)\right]^{1/2}\right)$$

其中 k_2 是任意常数。

由此可以看出, 在重离子的非简谐振动存在时, 孤子形状、速度等特征都发生重大变化。在 $\gamma \neq 0$ 时的孤波的振幅随 γ 的增加而减少, 但与 $\gamma = 0$ 时的解对照, 其对称性被破坏。

8.9.2 系统中的杂质的影响

在氢键系统中存在杂质时, 一定会破坏系统的均匀性, 影响孤子的状态。但杂质的性质不同, 产生的影响也不一样。对于一个吸引的杂质势, 在 Kink 孤子形成时可以激发一个杂质模, 则一个局域性的振动状态将在杂质附近出现, 这可以引起 Kink 孤子的散射。此时可用两个模型来描述杂质的效应。一个模型是相应于在质子系统的光学支与重离子子晶格的声学支之间的相互作用。另一模型是考虑相邻氢键链之间的相互作用, 此时重离子(或氧)子晶格是用另一类光学支描述。在线性激发谱中

存在的能隙是由于链间相互作用引起的。在第一种模型中，以变速运动的质子的孤子态会产生发射，其强度不是太小，并因重离子子晶格的能谱无能隙存在，还会在重离子晶格中产生线性波传递，使质子的迁移率改变。

为了计算方便，基于式(8.82)得出的式(8.85)和式(8.86)现在表示成

$$\tilde{R}_{\tau\tau} - \tilde{R}_{zz} - \tilde{R}(1 - \tilde{R}^2) = -\tilde{\alpha}\tilde{R}\tilde{U}_x \quad (8.120)$$

$$\tilde{U}_{\tau\tau} - \bar{s}^2\tilde{U}_{zz} = \tilde{\alpha}\tilde{\beta}\tilde{R}\tilde{R}_x \quad (8.121)$$

这里 $\tilde{R} = R/R_0$; $\tilde{U} = u/r_0$; $\bar{s}^2 = v_0^2/v_1^2$; $v_1 = \frac{1}{2}r_0^2\omega_1^2$; $v_0 = r_0(W/M)^{1/2}$; $\tilde{\alpha} = \frac{2(\chi_1 + \chi_2)r_0^2}{\omega_0^2}$;

$\tilde{\beta} = \left(\frac{m}{M}\right)\left(\frac{R_0^2}{r_0^2}\right)\bar{\omega}_0^2 = \frac{4U_0}{mR_0^2}$; $t = \bar{\omega}_0\tau$; $x = \frac{\bar{\omega}_0}{v_0}z$ 。这里的参数 $\tilde{\alpha}$ 标志了在质子与重离子之间的耦合作用的大小。

在缺乏杂质时，它们支撑了在均匀氢键系统中存在的 **Kink** 孤子，现在把这些解表示成

$$\tilde{R} = \pm \tanh(\xi/r_0(v)), \quad \frac{d\tilde{U}(\xi)}{d\xi} = \frac{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}{2(\bar{s}^2 - v^2)\cosh^2(\xi/r_0(v))} \quad (\xi = z - v\tau) \quad (8.122)$$

这里,

$$r_0^2(v) = \frac{2(1-v^2)(v^2 - \bar{s}^2)}{(v^2 - \bar{s}^2 + \tilde{\alpha}^2\tilde{\beta})}$$

考虑到杂质的影响之后，运动方程式(8.120)和式(8.121)变成

$$\tilde{R}_{\tau\tau} - \tilde{R}_{zz} - \tilde{R}(1 - \tilde{R}^2) = -\tilde{\alpha}\tilde{U}_x\tilde{R} \quad (8.123)$$

$$\tilde{U}_{\tau\tau} - \bar{s}^2\tilde{U}_{zz} = \tilde{\alpha}\tilde{\beta}\tilde{R}\tilde{R}_x - \varepsilon_M\delta(x)\tilde{U}_{\tau\tau} + \bar{s}^2\varepsilon_W\left[\delta(z)\tilde{U}_z\right]_z \quad (8.124)$$

当杂质较少时，仅在杂质附近重离子子晶格的参数改变，即上述解中的参数仅做了以下变换：

$$\begin{aligned} M &\rightarrow M + r_0\Delta M\delta(t) = M(1 + \varepsilon_M\delta(z)) & \left(\varepsilon_M = r_0\left(\frac{\bar{\omega}_0}{v_1}\right)\frac{\Delta M}{M}\right) \\ W &\rightarrow W + r_0\Delta W\delta(t) = W(1 + \varepsilon_W\delta(z)) & \left(\varepsilon_W = r_0\left(\frac{\bar{\omega}_0}{v_1}\right)\frac{\Delta W}{W}\right) \end{aligned} \quad (8.125)$$

质子的孤子态通过杂质散射而改变其速度从而产生辐射。由孤子态引起的发射能量用线性系统的谱特征来确定。由于它是小振幅的辐射，则当孤子态从无穷远运动到杂质附近时可能被捕获。在这一过程中，由这种辐射感应引起的阈值速度不是太小，它将严重影响孤子的传递。所引起的具体效应可从计算谱密度和发射的整个

能量来确定。在零级近似下, 可仅考虑缓慢运动, 即 $v^2 \square \bar{s}^2 - \tilde{\alpha}^2 \tilde{\beta}$ 和 \bar{s}^2 时的发射能量。为此, 现求解方程为

$$U_{\tau\tau} - \bar{s}^2 U_{xx} = F(z, \tau)$$

其中, $F(z, \tau) = \alpha \tilde{R} \tilde{R}_x - \varepsilon_M \delta(z) U_{\tau\tau} + \bar{s}^2 \varepsilon_W \delta(z) U_z \Big|_z$

如果 $F(z, \tau)$ 是 z 的局域函数, 则由这种作用所产生的发射波场具有 $\tilde{U}(z, \tau) = \frac{1}{2\pi} \times \int_{-\infty}^{+\infty} dk \tilde{U}_k(\tau) e^{ikz}$ 形式。现让 $F_k(\tau)$ 是 $F(z, \tau)$ 的傅里叶分量, 则上述方程变成

$$\frac{da_k(\tau)}{d\tau} = -i\bar{s}ka_k(\tau) + F_k(\tau), \quad \left(a_k(\tau) = \frac{dU_k(\tau)}{d\tau} - i\bar{s}kU_k(\tau) \right) \quad (8.126)$$

则重离子子晶格产生的格波具有的能量为

$$E_{\text{em}} = \frac{1}{2\bar{\omega}_0} \int_{-\infty}^{+\infty} (U_\tau^2 + \bar{s}U_z^2) dz = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\alpha}(k) dk$$

其中, $\dot{\alpha}(k) = \frac{1}{2\bar{\omega}_0} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \int_{-\infty}^{+\infty} F(z, \tau) e^{-ik(z-\bar{s}\tau)} dz \right|^2$

如果 $F(z, \tau)$ 是式(8.124)的右边的表示式, 则其发射仅由此式中的第二项和第三项产生, 将这个表示式代入上式, 在 $v^2 \square \bar{s}^2 - \tilde{\alpha}^2 \tilde{\beta}$ 情况下, 其谱密度可表示为

$$\dot{\alpha}(k) = \frac{1}{8} \pi^2 \tilde{\alpha}^2 \tilde{\beta} \left(\frac{kr'_0}{v} \right)^4 (\varepsilon_M v + \varepsilon_W \bar{s})^2 / \sinh^2(\pi k \bar{s} r'_0 / 2v)$$

这里 $r'_0 = r_0(v=0)$ 。在 $v>0$ 时由上式可求出整个发射的能量为 $E_{\text{em}} = \frac{4\pi \tilde{\alpha}^2 \tilde{\beta} v}{15\bar{s}^5 r'_0} \times (\varepsilon_M v + \varepsilon_W \bar{s})$ 。

从此式可以看出, 这个发射能主要是由质子的孤子态的速度决定的, 但它的影响是小的。

8.9.3 系统中的迁移偶极矩对质子的孤子态的影响

由重离子和氢原子组成的氢键分子系统中存在复杂的电偶极-偶极相互作用。其中的重离子子晶格就包含有大量的原子组成的原子集团或极性分子, 它们的极化会出现不同的电偶极矩。但是在庞小峰的理论模型的哈密顿量式(8.82)仅考虑了由质子与质子之间的永久偶极-偶极作用引起的共振相互作用, 未考虑重离子和氢原子之间相对运动导致的迁移偶极-偶极相互作用的效应。

由物理学可知, 具有电矩为 μ_1 和 μ_2 的永久偶极子, 在其尺度大大小于它们之间的距离 R_{12} 时, 其偶极-偶极相互作用势为 $U_{\text{int}} = -2\mu_1 \mu_2 / R_{12}^3$ 。则对于具有偶极矩分别

为 P_n 和 P_{n+1} 的, 位于系统中的第 n 位和第 $(n+1)$ 位的两个极性格子之间的偶极-偶极相互作用能为 $U_{\text{int}} = \sum_n \frac{1}{2\pi\epsilon_{00}} \left[\frac{P_n P_{n+1}}{r^3} - 3 \frac{(P_n r)(P_{n+1} r)}{r^5} \right]$ 就应当加在式 (8.82) 中, 这里 r 是两个偶极子之间的距离, ϵ_{00} 是真空的介电常数。现在将这个偶极-偶极相互作用表示为

$$H_{dd} = \bar{B} \sum_n P_n P_{n+1}$$

式中, $\bar{B} = \frac{1}{\pi\epsilon_{00}\bar{r}^3}$ 是一个平均值; P_n 表示了质子与重离子之间的相对运动所产生的电偶极矩。很明显, 它的大小与质子和重离子的距离直接相关。当质子在重离子上或处在它们的中间时, 由于电场的方向相反而相互抵消, 所以它的偶极矩为零。如果用 r 表示重离子与氢原子 H 的间距, r_0 是重离子之间的间距即晶格常数, 则这个偶极矩 P_n 可以近似表示三阶多项式, 即

$$P_n = \bar{\alpha}(x_n - X_n)(x_n - X_{n+1}) \left[x_n - \frac{1}{2}(X_n + X_{n+1}) \right] \quad (8.127)$$

式中, $\bar{\alpha}$ 是一个常数; x_n 和 X_n 可表示为

$$x_n = nr_0 + \frac{1}{2}r_0 + R_n, \quad X_n = nr_0 + u_n, \quad X_{n+1} = (n+1)r_0 + u_{n+1} \quad (8.128)$$

由系统的哈密顿函数 $\tilde{H} = H + H_{dd}$ [这里 H 参见式 (8.82)] 可求出

$$\begin{aligned} \frac{d^2 R_n}{dt^2} = & -\omega_0^2 R_n + \frac{1}{2}\omega_1^2 (R_{n+1} + R_{n-1}) + 4U_0 R_0^{-2} \left(1 - (R_n/R_0)^2 \right) R_n - \chi_1 (u_{n+1} - u_{n-1}) R_n - \\ & \chi_2 [(u_{n+1} - u_n) R_{n+1} + (u_n - u_{n-1}) R_{n-1}] + \bar{B} \frac{\partial P_n}{\partial R_n} (P_{n+1} + P_{n-1}) \end{aligned} \quad (8.129)$$

$$\begin{aligned} \frac{du_n}{dt^2} = & \frac{W}{M} (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \frac{1}{2} \frac{m}{M} \chi_1 (R_{n+1}^2 - R_{n-1}^2) + \frac{m}{M} \chi_2 (R_n R_{n+1} - R_n R_{n-1}) + \\ & \bar{B} \frac{\partial P_n}{\partial u_n} (P_{n+1} - P_{n-1}) + \bar{B} \frac{\partial P_{n-1}}{\partial u_n} (P_n - P_{n-2}) \end{aligned} \quad (8.130)$$

这组方程极难求解, 但可求出近似解。现认为重离子子晶格是“准冻结”的, 这相当于重离子子晶格处于惯性运动状态, 不跟随质子的快速运动而运动。此时 u_n 认为是很小的, 则我们仅求 R 的运动方程。于是整个系统的哈密顿量可近似表示

成 $H = H_p + H_{dd}$ ，则 $P_n = R_n \left(R_n^2 - \frac{1}{4} r_0^2 \right)$ ，在连续性近似下，上式可近似地表示为

$$R_{tt} - \bar{A} R_{xx} - \bar{C} R + \bar{D} R^3 - \bar{B} R^5 = 0 \quad (8.131)$$

式中， $\bar{A} = \left(\frac{1}{2} \omega_1^2 + \frac{1}{16} r_0^4 \bar{B} \right) r_0^2$ ； $\bar{C} = \left(\frac{4U_0}{R_0^2} - \omega_0^2 + \omega_1^2 + \frac{1}{8} r_0^4 \bar{B} \right) > 0$ ； $\bar{D} = \frac{4U_0}{R_0^2} + \frac{1}{2} r_0^2 \bar{B}$ ， $\bar{B} > 0$ ，这是 ϕ^6 型方程。现研究以特征速度 v 运动的，具有不变波型的行波局域解 $\bar{R} = \gamma(\xi')$ ， $\xi' = X - vT$ 。很奇怪，在此种近似情况下，质子运动方程与在重离子子晶格做非简谐振时质子的动力学方程式(8.119)相似。它们都是 ϕ^6 型方程，仅是方程中的各项系数不同。这表明在考虑重离子的非简谐振时质子的传递特性与在重离子子晶格准冻结和忽略质子相对于重离子运动时所导致的偶极-偶极相互作用的高阶弱效应时质子的传递特征很相似，其中仅是质子运动速度，质子的孤子态的振幅、宽度等不同。此解仅能用来解释氢键系统中的离子缺陷，这是以上模型的弱点。在特殊条件下，式(8.131)能求出解析解。

8.10 氢键系统中质子的孤子态的实验证实

现又如何证实以上得出的质子的孤子局域态的真实性呢？由于在氢键分子系统中的质子带有电荷，在电场作用下它会沿电场方向迁移，产生电导性。本节以冰晶体作为一个典型的氢键系统研究它的导电性和迁移率随温度的变化及它的比热容值，并和实验值相比较来验证质子的孤子态的真实存在和理论的正确性。

8.10.1 外电场对质子孤子的影响

研究质子在氢键系统中在外电场作用下的传导性，即质子的迁移率和电导率是一个令人感兴趣的问题。由于质子孤子是一种集体效应，它包含了重离子子晶格的畸变，因此，外场与质子的孤子态的作用非常复杂。在外场存在时，相应的运动方程式(8.85)和式(8.86)中必须包括外电场的作用。当外电场施于氢键系统时，它不但对质子，而且对重离子有影响。但这两类对象的效果不同，外电场驱动正离子缺陷在质子子晶格中长距离地运动(由于质子质量小)，但重离子对外电场的响应，由于它与周围环境耦合较弱和质量大，则它局限于平衡位置的附近而有小的偏离。在第一级近似下，仅考虑均匀电场对质子传递的作用，而介质的阻尼效应仅用一个衰减项来模拟。于是，在一恒外场存在时氢键系统中质子传递的方程式(8.88)和式(8.86)变为

$$\left(v_1^2 - v^2 \right) \frac{\partial R}{\partial \xi^2} + \left(\omega_1^2 - \omega_0^2 \right) R + \frac{4\eta^2}{mR_0^2} R \left(1 - \frac{R^2}{R_0^2} \right) + v\Gamma_1 \frac{dR}{d\xi} + \frac{f}{m} = 0 \quad (8.132)$$

$$M \frac{d^2 u_n}{dt} + m \Gamma_2 \frac{du_n}{dt} = \beta (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \frac{1}{2} m \chi_1 (R_{n+1}^2 - R_{n-1}^2) + m \chi_2 (R_n R_{n+1} - R_n R_{n-1}) \quad (8.133)$$

这里 $\eta^2 = 1 - 2m^2 v_0^2 (\chi_1 + \chi_2) R_0^4 / U_0 M v_0^2 (1 - s^2)$, 其中 $\xi = x - vt$, f 是作用在质子上的外场力, Γ_1 和 Γ_2 是质子和重离子在外场存在时出现的阻尼衰减系数。为了寻求具有速度 v 运动的不变振幅的解, 现研究在连续性近似下, Γ_2 趋近于零的极限下的解。

如果不考虑衰减 Γ_1 的作用, 式 (8.133) 的势函数变成

$$U = -\frac{1}{2} m \varepsilon R^2 - \frac{1}{4} G m R^4 + U_0 + U(f) \quad (8.134)$$

式中, $U(f)$ 是与外力 f 有关的外势场能。研究表明外电场仅改变了双势阱的对称性,

使它变成不对称的分布。再设 $\rho = \frac{R}{R_0}$, $z = \xi \left(\frac{4\eta^2}{m r_0^2 (v_1^2 - v^2)} \right)^{1/2}$, 则式 (8.132) 变为

$$\rho_{zz} + \gamma(v) \rho_z + (1 + \sigma) \rho - \rho + F' = 0 \quad (8.135)$$

式中, $\gamma(v) = \left(\frac{m R_0^2 v^2 \Gamma_1^2}{4 \eta^2 (v_1^2 - v^2)} \right)^{1/2}$; $F' = f R_0 / 4 \eta^2$, $\sigma = \left(\frac{(\omega_1^2 - \omega_0^2) m R_0^2}{4 \eta^2} \right)$ 。

当 $f < \frac{2}{3} \sqrt{3}$ 和 $\sigma \ll 1$ 时, 式 (8.135) 的解是下列多项式的根:

$$P(\rho) = \rho^3 - (1 + \sigma) \rho - F' = (\rho - \rho_1)(\rho - \rho_2)(\rho - \rho_3) \quad (8.136)$$

其根有 $\rho_1 < \rho_2 < \rho_3$ 。若孤子的速度 v 满足 $\gamma(v) \approx 3\rho_3 / \sqrt{2}$, 则式 (8.135) 有 Kink 解:

$$R = \pm R_0 (\rho_1 + (\rho_2 - \rho_1)) [1 + \exp(\pm \mu_1 \xi)]^{-1} \quad (8.137)$$

这里 $\mu_1 = \frac{\rho_2 - \rho_1}{\sqrt{2}} \left(4\varepsilon / m R_0^2 (v_1^2 - v^2) \right)^{1/2}$ 。由 $\gamma(v) \approx 3\rho_3 / \sqrt{2}$ 定义的 Kink 传播速度通过 ρ_3 依赖于衰减效应和外电场的平衡。为了与式 (8.134) 的导数一致, v 必须等于 v_0 , 则 f 和 Γ_1 通过 $\gamma(v) \approx 3\rho_3 / \sqrt{2}$ 而相关。如果这些条件不能被满足时, 在 v_0 的附近的较大速度范围内, 在 Γ_2 趋于零的极限下, 式 (8.137) 仅能给出了一个近似解。这里 ρ_1

与 ρ_2 决定了 R 的反对称特性。在式(8.137)中的“+”和“-”表示 Kink 和反 Kink 孤子解。从式(8.136)和 $\gamma(v)$ 及 P_3 可得出 Kink 的速度与外电场之间的关系为

$$v^2 = \left[\frac{18\eta^2 \rho_3^2}{m\Gamma^2 R_0^2 + 18\eta^2 \rho_3^2} \right] v_1^2 \quad (8.138)$$

此式也可以从此系统中的能量平衡关系中得出。事实上,在连续性近似下,由外场 f 输入的功率为 $P_f = \sum_n f \dot{R}_n = 2fv(\rho_2 - \rho_1)R_0$ 。而耗散所损失的功率 $P_r = \sum_n (-m\Gamma \dot{R}_n) \times \dot{R}_n = \frac{1}{3} \Gamma m R_0^2 (\rho_2 - \rho_1)^2 v^2 (\mu_1)$ 。在 $P_f = P_r$ 关系中代入 μ_1 的值,并将 $16F'^2/(\rho_2 - \rho_1)^4$ 用 ρ_3^2 代替,便可得到式(8.138)。当 $f \rightarrow 0$, 但 $\Gamma \neq 0$ 时 $v \rightarrow 0$, 所以静态 Kink 是稳定的。同时,以任何初始速度运动的 Kink 在进入此介质中时都会逐渐变成静止的。当 $\Gamma \rightarrow 0$ 和 $f = 0$ 时,由式(8.138)求得的孤子速度是 v_1 的两倍,但其解不是稳定的,在速度高过于 v_1 时,会发射声波。最后,质子的孤子态会在 $v = v_1$ 的低速下稳定下来。对于弱外场 ($F' \ll 1$), 在 $\rho_3^2 \sim -F'$ (在 $F' < 1/\sqrt{27}$ 时) 和 $v \ll v_1$ 时, v 与 f 之间有线性关系 $v = \mu_0 f$ 。这里 $\mu_0 = \frac{3v_1}{4\Gamma\eta} (2/m)^{1/2}$ 是 Kink 的迁移率,这里 $f \ll 4\Gamma\eta(m/2)^{1/2}$ 。但对于大的外电场,此关系表示出强的非线性的。此时,这孤子的速度随外场的增加而增加,随耗散的增加而减少。相反,孤子的宽度随外场的增加而减少,并随耗散的增加而增加。在一般情况下,对于宽度逐步变小的 Kink 孤子,必须考虑由声子的发射所引起的附加衰减。在这种情况下,式(8.138)将会发生重大改变。

如果施加的电场力仅是时间 t 的函数,即 $f(t)$, 在不考虑重离子晶格的衰减效应 ($\Gamma = 0$) 时,从式(8.132)和式(8.133)可求出

$$R_{tt} - v_1^2 R_{xx} - \varepsilon R + GR^2 R + \Gamma \frac{dR}{dt} = \frac{f(t)}{m} \quad (8.139)$$

由于 $f(t)$ 仅与 t 有关,在 $f(t)$ 较小时可用微扰方法求解。于是可假设

$$R(x, t) = R_k(x, t) + \varphi(t) \quad (8.140)$$

这里 $R_k(x, t)$ 是满足式(8.92)的解。将式(8.140)代入式(8.139),忽略 $\varphi^3(t)$ 项,可近似求得

$$\varphi_{tt} + \Gamma \varphi_t - \varepsilon \varphi(t) = f(t)/m - \Gamma \frac{dR_k}{dt} = F(t) \quad (8.141)$$

在研究氢键系统中的缺陷在变化外电场中的动力学特性时可以使用缺陷动量的动力学方程。为了求出这个方程,现使用式(8.140)对应的系统的总动量为 $P = P_k - (\varepsilon_0/v_1)d_k\varphi_t$, 这里 $\varepsilon_0 = m(v_1/4\pi)^2$ 是能量的单位, $d_k = R(\infty, t) - R(-\infty, t)$ 。现用 $R_x(x, t) = R_{k,x}(x, t)$ 乘式(8.139)两边, 并对它积分和使用边界条件 $R_x(\pm\infty, t) = 0$, 及 $R_t(-\infty, t) = R_t(\infty, t)$ 以及式(8.139)和式(8.140), 则 Kink 和反 Kink 的动量 $P_k(\tau)$ 近似满足方程

$$\frac{d}{dt}P_k + \Gamma P_k - (\varepsilon_0/v_1)d_k\varepsilon\varphi(t) = 0 \quad (8.142)$$

该方程的一般解可写成

$$P_k(t) = P_k(0)e^{-\Gamma t} - \frac{\varepsilon_0}{v_1}d_k \left[\int_0^t F(t')e^{\Gamma(t'-t)}dt' - \varphi_t + \varphi_t^{(0)}e^{-bt} \right]$$

现设外力缺乏即 $F(t) = 0$, 或在 $f(t)/m = \Gamma \frac{dR_k}{dt}$ 时, 其初始条件为 $P_k(0) = 0$, $\varphi(0) = \varphi_0$ 和 $\varphi_t^{(0)} = 0$ 。使用在 $F(t) = 0$ 时式(8.141)的解, 从上式可求出随时间变化的缺陷动量 P_k 为

$$P_k(t) = -\frac{\varepsilon_0}{v_1}d_k\varphi_0\varepsilon \frac{\sin \Omega t}{\Omega} e^{-\Gamma t/2}, \quad \Omega^2 = \Omega_0^2 - (\Gamma/2)^2$$

如果外电场为谐振的交变电场 $f(t) = f_0 \cos(\Omega_\epsilon t + \delta_0)$, 这里 Ω_ϵ 和 δ_0 是交流驱动场的频率和初始相位。在初始条件 $\varphi(0) = 0$ 和 $\varphi_t(0) = 0$ 下, 在忽略 $\Gamma \frac{dR_k}{dt}$ 时, 从以上过程可得到

$$P_k(\tau) = P_k(0)e^{-\Gamma t} + \frac{\varepsilon_0}{v_1}d_k f_0 \left\{ \frac{1}{\Gamma^2 + \Omega_\epsilon^2} \left[e^{-\Gamma t} (\Gamma \cos \delta_0 + \Omega_\epsilon \sin \delta_0) - \Gamma \cos(\Omega_\epsilon t + \delta_0) - \Omega_\epsilon \sin(\Omega_\epsilon t + \delta_0) \right] + \left[(\Omega_\epsilon^2 - \Omega_0^2)^2 + \Gamma^2 \Omega_\epsilon^2 \right]^{-\frac{1}{2}} \right. \\ \left. \left[e^{-\Gamma t/2} \times \left(\Omega_0^2 \cos(\delta + \delta_0) \frac{\sin(\Omega t)}{\Omega} + \Omega_\epsilon \sin(\delta + \delta_0) \left(\cos(\Omega t) - \frac{\Gamma \sin(\Omega t)}{2\Omega} \right) \right) - \Omega_\epsilon \sin(\Omega_\epsilon t + \delta + \delta_0) \right] \right\}$$

这里 $\delta = \Gamma \Omega_\epsilon / (\Omega_\epsilon^2 - \Omega_0^2)$ 。在实际情况中, 常忽略衰减, 即 $\Gamma = 0$, 于是可求得 $x_k = x_k(t)$,

这里 x_k 表示 Kink 或反 Kink 质心的位置。显然, 孤子质心的速度 $v_k = dx_k/dt = M_k^{-1}P_k$ 。则由式 (8.142) 可以求得

$$x_k(t) = x_k(0) + \frac{\varepsilon_0}{M_k v_1^2} d_k f_0 \left\{ \left| \Omega_e^2 - \Omega_0^2 \right|^{-1} \left[\left(\frac{\Omega_e}{\Omega_0} \sin(\Omega_0 t) - \sin(\Omega_e t) \right) \sin \delta_0 + \right. \right. \\ \left. \left. (\cos(\Omega_e t) - \cos(\Omega_0 t)) \cos \delta_0 \right] + \Omega_e^{-2} \left[(\Omega_e t - \sin(\Omega_e t)) \sin \delta_0 - 2 \sin^2 \frac{\Omega_e t}{2} \cos \delta_0 \right] \right\}$$

这里 M_k 是 Kink 或反 Kink 的静止质量。从上式看到氢键系统中产生的缺陷的运动包括了一个振动项加上一个包含有正比于 $\sin \delta_0$ 的速度驱动项 (这里外场无常数分量)。这一结果意味着外电场能引起新的空态振动的调相, 它反映了此孤子态的粒子特性。

的确, 在这种变化的外力作用下, 由运动方程 $m \frac{dv}{dt} = A_0 \cos(\omega t + \delta_0)$ 可求得粒子的速度的常分量应等于 $(A_0/\omega) \sin \delta_0$, 这与数值结果一致。

8.10.2 在氢键系统中质子的迁移率和电导率

如果外加电场很大时, 则不但应考虑外场对质子动力学的影响, 也应考虑对重离子的影响。但是, 对它们的效果是不一样的, 于是用 F_1 和 F_2 来加以区分。在恒定电场时, 式 (8.88) 和式 (8.86) 变成

$$R_{tt} = -\varepsilon R + \frac{\omega_1^2 r_0^2}{2} R_{xx} + 2(\chi_1 + \chi_2) r_0 u_x R + \frac{4U_0}{R_0^4} |R|^2 - \Gamma_1 R_t - F_1/m \quad (8.143)$$

$$u_{tt} = v_0^2 u_{xx} + \frac{2(\chi_1 + \chi_2) m r_0}{M} R R_x - \Gamma_2 u_t - F_1/M \quad (8.144)$$

如前所知, 在此情况下, 质子晶格和重离子晶体中仍会产生 Kink-反 Kink 对, 它们都能在氢键系统中运动。它的动量仍可表示成

$$P = -\frac{1}{r_0} \int_{-\infty}^{+\infty} (m R_x R_t + M u_x u_t) dx \quad (8.145)$$

现在假设这种衰减效应和外场是这样小, 以至它仅影响 Kink-反 Kink 对的运动速度而不改变孤子的基本特性。在此情况下, 能解析地求出在外场作用的 Kink-反 Kink 对在氢键系统中的迁移率和电导率的大小。在此假设下, 将式 (8.92) 和式 (8.93) 代入式 (8.145), 经过运算可求得

$$\frac{dv}{dt} - \gamma' v = \left[\frac{3\sqrt{2}(v_1^2 - v^2)}{(3\varepsilon)^{1/2}} \bar{R}_0^{-1} \right] F, \quad \gamma' = \frac{m\Gamma_1 + B^2 \Gamma M}{m + B^2 M} + 2v \frac{dv}{dt}$$

$$F = F_1 + BF_2, \quad B = \frac{\sqrt{2}(\chi_1 + \chi_2)r_0}{Mv_0^2(1-s^2)} \left(\frac{v_1^2 - v^2}{G} \right)^{1/2} \quad (8.146)$$

由于 Kink-反 Kink 对的速度 v 小于两种子晶格中的声速, 即 $v \ll v_1, v \ll v_0$, 则可以把在 γ' 中包括有 v 的项忽视, 即让 $G = G_0 = \text{constant}$, $\bar{R}_0 = \bar{R}_0^0 = \text{constant}$, $\varepsilon = \varepsilon_0 = \text{constant}$, $B = B_0 = \text{constant}$ 和 $\gamma' = \gamma_0 = \text{constant}$ 。则式 (8.146) 变成

$$\frac{dv}{dt} - \gamma_0 v = \frac{3\sqrt{2}}{2\varepsilon_0^{1/2}} v_1^2 (\bar{R}_0^0)^{-1} F \quad (8.147)$$

式 (8.147) 很类似于在经典物理学中具有衰减效应的宏观粒子的运动方程, 从而显示了这个 Kink-反 Kink 孤子对的具有宏观粒子的特性。现研究质子的孤子态在恒外电场中的情况。这时 $F = q^* E = (q_1 + B_0 q_2) E$ (这里 q_1 和 q_2 是质子和重离子的有效电荷)。由此可从式 (8.147) 求出稳恒电流情况下 Kink-反 Kink 对的迁移率是

$$\mu_0 = \frac{3}{\sqrt{2}} (q_1 + B_0 q_2) v_1 r_0 / \bar{R}_0^0 \varepsilon_0^{1/2} (m\Gamma_1 + B_0 M\Gamma_2)$$

于是在氢键系统中带电的 Kink-反 Kink 对的运动引起的电导率为

$$\sigma = q^* n_0 \mu_0 = \frac{3}{2} (q_1 + B_0 q_2)^2 v_1 r_0 / \bar{R}_0^0 \varepsilon_0^{1/2} (m\Gamma_1 + B_0 M\Gamma_2)$$

这里 n_0 是氢键系统中单位体积内传导的质子数目。对于冰晶体, 一个广泛接受的物理参量的值是 $R_0 = 0.1 \text{ nm}$, $r_0 = 0.276 \text{ nm}$, $U_0 = 0.22 \text{ eV}$, $\chi = \frac{h\chi_1}{2\omega_0} = 0.10 \text{ eV}/\text{\AA}$,

$$M = 17 m_p, \chi' = \frac{h\chi_2}{2\omega_0} = 0.011 \text{ eV}/\text{\AA}, v_0 = 2 \times 10^4 \text{ ms}^{-1}, v_1 = (7 \sim 9.5) \times 10^3 \text{ ms}^{-1}, m = m_p,$$

$\omega_0 = (1 \sim 1.5) \times 10^{14} / \text{s}$, $\omega_1 = (4 \sim 5) \times 10^{13} / \text{s}$, $n_0 = 6 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$, $q_1 = 0.68e$, $\Gamma_1 \sim (0.6 \sim 0.7) \times 10^{14} / \text{s}$, $\Gamma_2 \sim (9.1 \sim 13) \times 10^{14} / \text{s}$ 和 $q_2 = 0.32e$ 。用以上公式求出了在冰中质子 (Kink-反 Kink 孤子对) 的迁移率 $\mu_0 \sim (6.6 \sim 6.9) \times 10^{-6} \text{ m}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 和电导率 $\sigma = (7.6 \sim 8.1) \times 10^{-3} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$ 。对于蛋白质分子, 应用前面给出的一些特征参数值和 $n_0 = 6 \times 10^{22} \text{ mol}^{-1}$, $\omega_0 = (1.1 \sim 1.5) \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, $\omega_1 = (6.2 \sim 7.5) \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$, $\Gamma_1 \sim (0.5 \sim 0.6) \times 10^{14} / \text{s}$, $\Gamma_2 \sim (1.0 \sim 1.1) \times 10^{14} / \text{s}$, $q_1 = 0.65e$, $q_2 = 0.35e$, 于是可求出在蛋白质分子中质子的迁移率为 $\mu = (9.2 \sim 9.7) \times 10^{-6} \text{ m}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 和电导率 $\sigma = (7.8 \sim 8.2) \times 10^{-3} (\Omega \cdot \text{m})^{-1}$ 。非常令人惊奇的是, 所求出的值和从冰中实验测量出的电导率值吻合, 后者是在 $(5 \sim 10) \times 10^{-2} \text{ cm}^2 / (\text{V} \cdot \text{s})$ 的半导体电导率的范围内。从而证明以上建立的理论和模型是正确的。因此, 使我们坚信在氢键系统中的导电载流子是一种新型的质子的孤子态。这在物理学上具有重要意义。

8.10.3 质子的孤子态的迁移率随系统的温度的变化特性

现在用式(8.143)和式(8.144)来研究由温度引起的热扰动和介质阻尼效应对处于外电场 \vec{E} 中的氢键系统——冰质子传导的影响。在这种情况下,必须把由式(8.72)表征的热扰动噪声力 $f(x,t)$ 加到重离子的动力学方程式(8.144)中。再按照在8.4节介绍的4阶Runge-Kutta方法对式(8.143)和式(8.144)进行数值模拟,求出其孤子态解。我们计算出了在不同外加电场 \vec{E} 的作用下,每一种孤子态的运动速度和确定相应的质子迁移率或速度随温度变化的改变情况。在这里研究了在150~270 K的温度范围内在两种电场强度,100 V/cm和200 V/cm,作用下其质子传导的速度变化。计算得到的质子的孤子态的迁移速率随 $1000/T$ 的变化关系示于图8.31(a)和图8.32(a)中。从这两幅图中可看到它们有共同的特性,即在大约 $T_{\min} = 191.21$ K的温度时,冰中质子的孤子态的速度达到一个最大值,但在温度增加后,它又逐渐减少。在 $T_{\min} = 211.5$ K时达到一个极小值,在此以后又逐渐随温度的增加而增加。这种质子的孤子态的迁移率随温度变化的非单调关系是与P.B.Hobbs, H.Engelbeart, B.Bullemer和N.Riehl等人实验测得的冰的迁移率的温度变化特性是一致的,后者示于图8.31(b)和图8.32(b)中。这个结果一方面证明证实了庞小峰理论模型的正确性,另一方面也确定了冰或氢键分子系统中的导电性是由质子做孤子运动引起的,于是也间接证明了质子的局孤子态的存在。

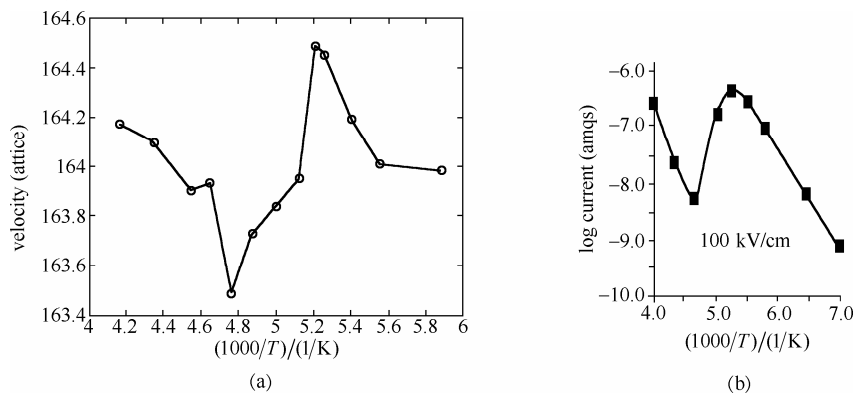


图 8.31 冰在 $E = 100$ V/cm 电场下的迁移速度与温度的倒数之间关系的 (a) 理论值和 (b) 实验值

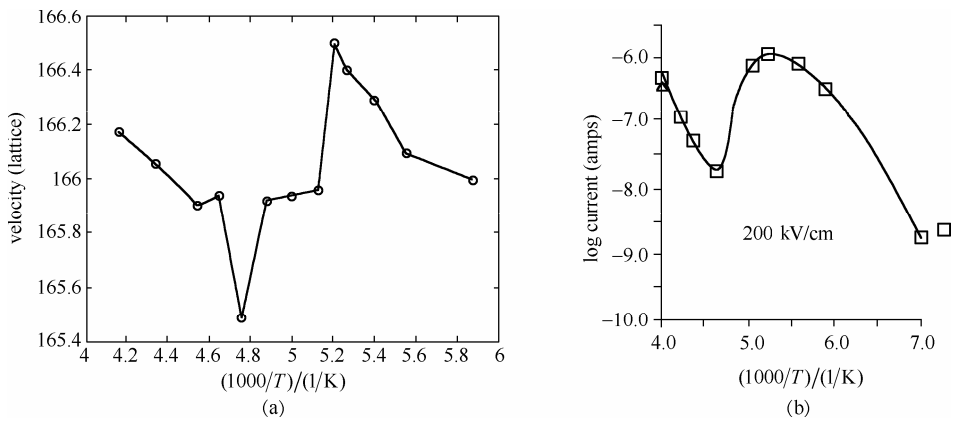


图 8.32 冰在 $E = 200 \text{ V/cm}$ 时的迁移速度与温度倒数之间关系的 (a)理论值和 (b)实验值

现在用庞小峰的理论来阐明这种迁移率随温度变化的非单调性的机理。从前面结果所知，在无外电场时，由系统的双阱势和质子与重离子相互作用势决定的质子的有效势能具有相对于中心点的对称性。但有外电场时质子的势函数将会畸变，此时质子便倾向于沿电场方向运动。但质子所受到的势场是非线性的，则处在势场的势垒顶和半腰与势阱底部的质子的运动特性是不一致的，其加速度也是不同的。当考虑介质的热扰动时，一个具有给定温度依赖性宽度的高斯无规位移势是被强加在重离子子晶格上，但它对处于不同势能位置上的质子的效果是不一样的，并且是随温度变化的。在低温时，处于势垒顶部的质子相对于其他部分的质子而言，所受到的热扰动对它的运动有助推作用，更有利于它穿过势垒向势阱低的运动。这种运动趋势又随温度的升高而增加。于是它的迁移率随温度的增加而增大，并在一个适当的较低温度时出现一个迁移率的极大值。但是，当温度继续升高时，处在其他势能位置上的质子也受到了热扰动的作用，而频繁地隧道过势垒。但这种行为由于这些质子本身的能量较小而易受热无规律运动的阻扰，则在温度继续升高时，其阻碍作用更加明显。于是质子的迁移率降低，并在一个特定温度下会出现一个迁移率的极小值。因此，质子的孤子态的迁移率的非单值效应就是由系统的非线性作用、双阱势、外电场和热扰动共同作用所导致的结果。

8.10.4 质子的孤子态的传导引起的比热容和临界温度

前面仅把质子和重离子看成一个经典粒子来处理。但是，质子和重离子是具有波-粒二象性的微观粒子，它们的运动遵从量子理论。所以这里运用量子化理论来研究质子的传递。在这种情况下，现采用二次量子化方法，将式(8.2)代入式(8.82)的哈密顿量中，于是式(8.82)变成

$$\begin{aligned}
H = & \sum_n \left[\hbar \omega_0 (b_n^\dagger b_n + 1/2) - (\hbar \omega_1^2/4) (b_n + b_n^\dagger) (b_{n+1} + b_{n+1}^\dagger) + \right. \\
& U_0 \left[1 - \frac{\hbar}{2m\omega_0 R_0^2} (a_n + a_n^\dagger)^2 \right] + \sum_n \left[\frac{M}{2} P_n^2 + \frac{\omega}{2} (u_n - u_{n-1})^2 \right] + \\
& \hbar \chi_1 / 4 \omega_0 \sum_n (u_{n+1} - u_{n-1}) (b_n + b_n^\dagger) (b_n + b_n^\dagger) + \\
& \left. \hbar \chi_2 / 2 \omega_0 \sum_n (u_{n+1} - u_n) (b_n + b_n^\dagger) (b_n + b_n^\dagger) \right] \quad (8.148)
\end{aligned}$$

这里 $b_n^\dagger (b_n)$ 是质子的产生(消灭)算符, 并利用了 $R_n = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0} \right)^{1/2} (b_n^\dagger + b_n)$ 和 $p_n = -i \left(\frac{2m\omega_0}{\hbar} \right)^{1/2} (b_n - b_n^\dagger)$ 等关系。

根据质子-重离子耦合作用产生的集体激发的特点, 则由质子的局域性涨落和由重离子子晶格的结构畸变导致的集体激发常用以下一个相干态或准相干态来表示

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\lambda'} \left(1 + \sum_n \varphi_n(t) b_n^\dagger \right) |o\rangle_{\text{pr}} \exp \left\{ \sum_n \frac{1}{i\hbar} [u_n(t) P_n + \pi_n(t) u_n] \right\} |o\rangle_{\text{ph}} \quad (8.149)$$

式中, $|o\rangle_{\text{pr}}$ 和 $|o\rangle_{\text{ph}}$ 是质子和声子的基态; λ' 是归一化常数。为了计算方便, 在以下选 $\lambda' = 1$ 。使用前面方法和 Heisenberg 方程, 在连续性近似下可求得

$$M \frac{\partial^2}{\partial t^2} u(x, t) = \beta l^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) + \hbar (\chi_1 + \chi_2) l \frac{\partial}{\partial x} |\varphi(x, t)|^2 \quad (8.150)$$

从 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi\rangle = \hat{H} |\Phi\rangle$ 可求得

$$\begin{aligned}
i\hbar \dot{\varphi}_n = & \left(\frac{3\hbar\omega_0}{2} + G(t) + \frac{U_0}{4} - \frac{\hbar U_0}{ml^2\omega_0} \right) \varphi_n + \frac{\hbar\chi_1}{2\omega_0} (u_{n+1}(t) - u_{n-1}(t)) \varphi_n + \\
& \frac{\hbar\chi_2}{2\omega_0} \{ [u_{n+1}(t) - u_n(t)] \varphi_{n+1} + [u_n(t) - u_{n-1}(t)] \varphi_{n-1} \} + \left(\frac{\delta\hbar U_0}{m^2 r_0^4 \omega_0^2} \right) \varphi_n - \\
& \frac{\hbar\omega_1^2}{4\omega_0} (\varphi_{n+1} - \varphi_{n-1}) + \frac{8\hbar^2 U_0}{m^2 r_0^4 \omega_0^2} |\varphi_n|^2 \varphi_n \quad (8.151)
\end{aligned}$$

在连续性近似下, 按照前面的方法, 从式(8.150)和式(8.151)可以求出 $\varphi_n(x, t)$ 和 $u(x, t)$ 所满足的运动方程, 从而可给出此系统的两个相互作用系数 ε 和 G , 它们与式

(8.89)类似。在 $G>0$ 和 $\varepsilon>0$ 时, 可求得质子满足非线性 **Schrödinger** 方程, 而重离子满足 ϕ^4 场方程。这是不同于前面方法求出的运动方程。它们的解可分别表示为

$$\varphi(x,t) = \pm \sqrt{\mu/2} \tanh\left[(\mu/r_0)(x-x_0-vt)\right] \times \exp\left\{i\left[\left(-\frac{\hbar v}{2Jr_0^2}\right)(x-x_0) - E_{\text{sol}}t/\hbar\right]\right\} \quad (8.152)$$

$$u(x,t) = \mp \left[\hbar(\chi_1 + \chi_2)\mu/Mv_0^2(1-s^2)\right] \text{sech}\left[\frac{\mu}{r_0}(x-x_0-vt)\right] \quad (8.153)$$

但当 $G<0$, $\varepsilon<0$ 时, 其解分别为

$$\varphi(x,t) = \sqrt{|\mu|/2} \text{sech}\left[\frac{|\mu|}{r_0}(x-x_0-vt)\right] \exp\left\{i\left[\left(-\frac{\hbar v}{2Jr_0^2}\right)(x-x_0) - E_{\text{sol}}t/\hbar\right]\right\} \quad (8.154)$$

$$u(x,t) = \frac{\hbar(\chi_1 + \chi_2)|\mu|}{Mv_0^2(1-s^2)} \tanh\left[\frac{|\mu|}{r_0}(x-x_0-vt)\right] \quad (\mu = G/4J) \quad (8.155)$$

从这一研究看到, 在量子化系统中可得到与经典情况相同形式的孤子态解。而形成这种孤子态的非线性作用仍由双阱势和质子与重离子之间的耦合相互作用来决定, 即由它们之间的竞争决定了孤子态的性质。当双阱势大于耦合作用时即 $\varepsilon>0$, $G>0$ 时的解式(8.152)和式(8.153)表示了质子越过双阱势的势垒从一个阱向另一个阱的跳跃, 即它表示了氢键系统中产生的离子缺陷的运动。相反, 当耦合作用大于双阱势, 即 $\varepsilon<0$, $G<0$ 时的解式(8.154)和式(8.155)表示了质子通过自陷机制从重离子的一边运动到另一边。因此, 此解表示了氢键系统中的键缺陷的运动。因此, 所得的解也都能很好地解释氢键系统中两类缺陷的相互转换和质子的传递机制, 于是, 此理论是可利用的。

在以上研究中, 都未考虑氢键系统的温度效应, 即把它当成是 $T=0\text{ K}$ 的物理系统。实际上, 任何系统都处在一定温度下。在有温度时, 质子的传递要发生变化。质子的孤子态将会和由温度引起的热声子相互作用而损失能量。这不但使系统的能量与温度有关, 而且使孤子衰减, 从而使孤子的存在有一个临界温度。现在把氢键系统看成是与一个温度为 $T \neq 0\text{ K}$ 的恒温器接触的。此时, 系统中存在热声子激发, 于是, 这个系统的波函数从式(8.149)变成

$$|\Phi_v\rangle = |\Phi\rangle|\beta_n\rangle = \frac{1}{\lambda'} \left(1 + \sum_n \varphi_n(t)b_n^+\right) |o\rangle_{\text{pr}} \exp \sum_q \frac{1}{i\hbar} [\beta_{nq}^*(t)a_q - \beta_{nq}(t)a_q^+] |v\rangle \quad (8.156)$$

这里 $|v\rangle = \prod_q |v_q\rangle = \prod_q (v_q)^{-\frac{1}{2}} (a_q^+)^{v_q} |o\rangle_{\text{ph}}$, 此处 $a_q^+(a_q)$ 是具有波矢为 q 的热声子的产生(消灭)算符, 它们和 u_n 以及 P_n 的关系如式(8.3)所示。按照上述方法, 在连续性近

似下从海森堡方程可求得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \varphi(x, t) = \varepsilon \varphi(x, t) - Jr_0^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \varphi(x, t) - G(T) |\varphi|^2 \varphi(x, t) \quad (8.157)$$

式中,

$$\varepsilon = \left(\varepsilon_0 - 2J + \frac{2\hbar^2 U_0}{mR_0^2 \omega_0^2} - \frac{6\hbar^2 U_0}{mR_0^4 \omega_0} \right), \quad \delta_0 = \frac{(\chi_1 + \chi_2)^2}{4W(1-s^2)J\omega_0^2 r_0}$$

$$G(T) = \left[\frac{8\hbar^2 U_0}{m^2 R_0^4 \omega_0} - \frac{\hbar^2 r_0^2 (\chi_1 + \chi_2)^2}{\omega_0^2 M v_0^2 (1-s^2)} \right] - r_0 \delta_0 J D F(T), \quad D = \frac{\pi r_0 (\chi_1 + \chi_2)^2}{4\omega_0^2 W v_0 \hbar (1-s^2)}$$

$$F(T) = \frac{r_0}{\pi N} \sum_q (2\bar{v}_q + 1) |q|, \quad \bar{v}_q = (e^{\hbar \omega_q / K_B T} - 1)^{-1}$$

此处使用了 Davydov 的近似方法。式(8.155)的解很类似于式(8.150)~式(8.153)。

仅将其中的 μ 改换成 $\mu(T) = G(T)/4J$ 。显然, 在 $G(T) > 0$ 时, 才有其孤子解存在。

当 $G(T) = 0$, 非线性作用消失, 孤子不存在。由此式可求出孤子存在的临界温度:

$$T_c = \frac{\hbar v_0 \pi}{2r_0^2 \delta_0 D J K_B} \left[\frac{3\hbar^2 U_0}{2m^2 R_0^4 \omega_0^2} - \frac{\hbar^2 (\chi_1 + \chi_2)^2 r_0^2}{M v_0^2 (1-s^2) \omega_0^2} \right]$$

将其代入前面列出来的蛋白质分子氢键系统的物理参数值, 可以大概估计这一个临界温度 $T_c = 318.3 \sim 321.4$ K。

利用上式解和系统的能量公式, 可求出在这种情况下孤子的能量为

$$E = \varepsilon + \frac{1}{2} m v^2 + \frac{G(T)}{16J} - \frac{\hbar^2 (\chi_1 + \chi_2)^2 (1-s^2) r_0^2}{24 J M v_0^2 (1-s^2)^3 \omega_0^2} G(T) = E_0 + \frac{1}{2} M_{\text{sol}} v^2$$

显然, 孤子的能量是依赖于温度 T 的, 则由于孤子的热运动所导致的比热容为 $C_v = dE/dT$ 。则在高温的 $(K_B \gg \hbar \omega_q)$ 比热容可求得为

$$C_v = K_B (A' + B'T) \quad B' = 4r_0^3 \delta_0^2 J^2 D^2 / \hbar v_0 \pi$$

式中, $A' = \frac{\hbar r_0^4 \delta_0 D (\chi_1 + \chi_2)^2 R_0^2 (1+s^2)}{12\pi M v_0^3 \omega_0^2 (1-s^2)} - 2r_0 \delta_0 J D W'', \quad W'' = \frac{3\hbar^2 U_0}{2m R_0^4 \omega_0^2} - \frac{\hbar (\chi_1 + \chi_2)^2 r_0^2}{M v_0^2 (1-s^2) \omega_0}$

这个结果与 Mrevlishvil 等人在氢键系统的蛋白质分子中测得的比热容 $C_v = K_B (\alpha' + \nu'T)$ 的规律一致, 可见这个模型是正确的。同时, 这又一次从实验上证明在此系统中质子是具有波-粒二象性的局域孤子态。

在 $(K_{BT} \ll \hbar \omega_q)$ 的低温时, 可求得此时的比热容可表示成

$$C_v = \tilde{Q}T + \tilde{D}T^3$$

式中,

$$\tilde{Q} = \frac{r_0^5 \delta_0 D (\chi_1 + \chi_2)^2 (1 + s^2) \delta_0 D}{72 M^2 v_0^4 (1 - s^2) \omega_0^2} + \frac{r_0^4 \delta_0^2 J^2 D^2}{3 \hbar^2 v_0^2} - 2 M r_0^3 \delta_0 J D / \hbar^2 v_0^2$$

$$\tilde{D} = \frac{2 r_0^4 \delta_0^2 J^2 D^2 K_B^2}{9 \hbar^2 v_0^4}$$

这个结果类似于在固体中电子和晶格的热运动所产生的比热容。

习题

1. 从半量子化(即仅对孤子采用式(8.2)进行量子化,而对晶格振动不量子化)的乙酰苯胺分子的哈密顿量式(8.1)出发,求出其动力学方程,并求出它的孤子解和粒子的动量与能量。
2. 用4阶 Runge-Kutta 方法对分立动力学方程式(8.67)~式(8.70)进行数值求解,给出它的传播图像。
3. 在氢键系统中采用变换式(8.2)对哈密顿量式(8.82)进行半量子化后,求出其质子和重离子的动力学方程及其解,并研究这个解的特性。

主要参考文献

- [1] Pang Xiao-feng. Quantum Mechanics in Nonlinear Systems. World Scientific Publishing Co., 2005.
- [2] Pang Xiao-feng. The behaviour and properties of microscopic particles in nonlinear systems, in soliton: Research, Technology and Applications. Nova Science Publishers Inc. New York, 2009.
- [3] 庞小峰. 非线性量子力学理论. 重庆: 重庆出版社, 1994.
- [4] 庞小峰. 孤子物理学. 成都: 四川科技出版社, 2003.
- [5] Pang Xiao-feng, features and states of microscopic particles in nonlinear quantum-mechanics systems, *Frontiers of physics in China*, 2008, 3(2): 413-445
- [6] 郭柏灵和庞小峰. 孤立子. 北京: 科学出版社, 1987.
- [7] Pang Xiao-feng. The wave-corpuscule duality of microscopic particles depicted by nonlinear Schrodinger equation, *Physica B*. 2008, 403: 4292~4300
- [8] Pang Xiao-Feng. The Schrodinger Equation only Describes Approximately the Properties of Motion of Microscopic Particles in Quantum Mechanics, *Nature Sciences*, 2008), 3(1): 29~38
- [9] Pang Xiao-feng. Investigations of properties and essences of macroscopic quantum effects in superconductors by nonlinear quantum mechanics, *Nature Sciences*, 2007, 2(1): 42~51
- [10] Pang Xiao-feng. The stability of microscopic particles described by nonlinear Schrödinger equation, *Mod. Phys.Lett. B*, 2009, 23: 939~950
- [11] PANG Xiao-feng. The dynamic natures of microscopic particles described by nonlinear Schrödinger equation, *Physica B*, 2009, 404: 3125~3139
- [12] Pang Xiao-feng. An improvement of the Davydov theory of bio-energy etransport in the protein molecular systems, *Phys. Rev. E*, 2000, 62: 6989~6998
- [13] Pang Xiao-feng. Comment “the thermodynamic properties of α -helix protein, A soliton approach”, *Phys. Rev.* 1994, 49: 4747~4751
- [14] Pang Xiao-feng and Feng Yuan-ping, mobility and conductivity of the proton transfer in hydrogen bonded molecular systems, *Chemical Physics Letters*, 2003, 373: 392~398
- [15] Pang Xiao-feng. Properties of nonadiabatic quantum fluctuations for the strongly coupled electron-phonon systems, *Science in China, G*, 2008, 51: 225~336
- [16] Pang Xiao-feng. the conductivity properties of protons in ice and mechanism of magnetization of liquid water *European. Phys. J.B*, 2006, 49: 3~23

- [17] Pang Xiao-feng. Influences of heat bath and structure disorder in protein molecules on the soliton transported bio-energy in the improved model, *J.Phys. condensed matter* 2006, 18: 613~627
- [18] Pang Xiao-feng Zhang Huai-wu, Yu Jia-feng Feng Yuan-ping, States and properties of the soliton transported bio-energy in nonuniform protein molecules at physiological temperature, *Physics Letters A* 2005, 335: 408~418
- [19] Pang Xiao-feng. Conductivity properties of the proton transfer exposed in externally applied fields in hydrogen-bonded systems, *Physics Letters A* 2004, 330: 245~253
- [20] Pang Xiao-feng. Dynamic properties of proton transfer in the hydrogen-bonded molecular systems, *J. Physics, condensed matter*, 2000, 12: 885~906
- [21] Pang Xiao-feng. The lifetime of the soliton in the improved Davydov model at the biological temperature 300K for protein molecules, *European Phys. J.B* 2001, 19: 297~316
- [22] Pang Xiao-feng, The effect of Raman scattering accompanied by the soliton excitation occurred in the molecular crystals, *Physica D* 2001, 154: 138~158
- [23] Pang Xiao-feng. Effects of squeezing-antisqueezing in strongly coupled electron-phonon systems, *Phys. Lett. A*, 1999, 25: 466~478
- [24] Pang Xiao-feng. Influence of the soliton in anharmonic molecular crystals with temperature on Mossbauer effect. *European Physical Journal B*, 1999, 10: 415~427
- [25] E. Majernikova, Pang Xiao-Feng. Stabilization of a polaron due to quantum fluctuation correlated with phonon displacement, *Phys. Lett. A*, 1997, 230: 89~98
- [26] Pang Xiao-feng. The properties of a collective excitation in organic protein molecular systems, *J. Phys. condensed matter*, 1990, 2: 9541~9560
- [27] Pang Xiao-feng. The properties of the ground state of strongly coupled electron-phonon systems with squeezing-antisqueezed effect, *J. Phys. Chem. Solids*, 2000, 62: 701~712
- [28] Pang Xiao-feng. Quantum vibrational energy-spectra of organic molecular crystalline chains, *J. Phys. Chem. Solids*, 2001, 62: 793~796
- [29] Pang Xiao-feng. The properties of quantum fluctuations nonadiabatically coupled electron-phonon systems with correlated displacement and squeezing, *J. Phys. Chem. Solids*, 2001, 62: 491~503
- [30] Pang Xiao-feng. Investigations of properties of motion of superconductive electrons in superconductors by nonlinear quantum mechanics, *J. Electronic science and technology of China*, 2008, 6(2): 205~211
- [31] 庞小峰. 非线性量子力学的基本理论. 潜科学杂志, 1985, 5: 16~20
- [32] 庞小峰. 非线性量子力学理论, 在刘世编辑的《新科学演研究》中. 北京: 科学技术出版社, 1993.
- [33] D. Bohr and J. Bub, Where can negative protons be found, *Phys. Rev.*, 1935, 48: 169~176
- [34] E. Schrodinger. Collected paper on wave mechanics. Blackie and Son, London: 1928.

- [35] E. Schrodinger. Proc. Cambridge Phil. Soc., Discussion of probability relations between separated systems, 1935, 31: 555~561
- [36] Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen, Z. Phys., 1925, 33: 879~884
- [37] M. Born and L. Infeld, Foundation of the new field theory, Proc. Roy. Soc. A, 1934, 144: 425~431
- [38] P. A. Dirac. The Principles of Quantum Mechanics. Clarendon Press, Oxford: 1967.
- [39] S. Diner, D. The Wave-Particle Dualism, Dordrecht: Riedel, 1984.
- [40] M. Ferrero. New Developments on Fundamental Problems in Quantum Physics. Dordrecht: Kluwer, 1997.
- [41] M. Ferrero. Fundamental Problems in Quantum Physics. Dordrecht: Kluwer, 1995.
- [42] L. de Broglie. Nonlinear Wave Mechanics: A Causal Interpretation. Amsterdam: Elsevier, 1960.
- [43] P. B. Burt. Quantum Mechanics and Nonlinear Waves. Harwood Academic Publisher, New York, 1981.
- [44] A. S. Davydov. Solitons in Molecular Systems. D.Reidel Publishing Comp., Dordrecht, 1991.
- [45] J. Satsuma. Initial value problems of one-dimensional self-modulation of nonlinear waves in dispersive media. Prog. Theor. Phys. (Suppl.), 1974, 55: 284
- [46] S.Burger. Dark Solitons in Bose-Einstein Condensates, Phys. Rev. Lett. 1999, 83: 5198~5201.
- [47] M.Toda. Nonlinear waves and solitons. Academic Publishers, Dordrecht, 1989.
- [48] A.Hasegawa. Generation of a train of soliton pulses by induced modulational instability in optical fibers. Opt. Lett., 1984, 9: 288~296
- [49] Pang Xiao-feng. Influence of structure disorders and temperatures of systems on the bio-energy transport in protein molecules. Frontiers of physics in China, 2008, 3(4): 1~32
- [50] A. Desyatnikov. Three-dimensional spinning solitons in dispersive media with the cubic-quintic nonlinearity. Phys. Rev., 2000, 61: 3107~3119.
- [51] 崔洪农. 非传播孤立波的特性研究. 水动力学研究进展, 1991, 16 (1) : 18~31
- [52] Pang Xiao-feng. Study of experiment for non-propagating solitary wave. Proc. 4th ACFM, Hong Kong, 1989, 123~137
- [53] Pang Xiao-feng. Study on experiment and theory for non-propagating hydrodynamic solitary wave. Proc. 4th APPC. Korea, 1990, 156~158
- [54] R.J.Wu. Observation of a Nonpropagating Hydrodynamic Soliton, Phys.Rev.Lett., 1984, 52: 1421~1423
- [55] A.Laraza. Theory of nonpropagating hydrodynamic solitons. Phys. Lett. A, 1984, 103: 15~24
- [56] Pang Xiao-feng. The theory of non-linear quantum mechanics. Proc. ICNP, 1989, 217~219
- [57] Pang Xiao-feng. Non-linear quantum mechanics and related problem,. Proc. ICIPES, Beijing, 1991, 76~78
- [58] Pang Xiao-feng. The elementary principle and theory for non-linear quantum mechanics. Proc. ICRRQD Liblice, Czech, 1990, 173~175

- [59] A.S.Davydov. Biology and quantum mechanics. New York, Pergamon, 1982.
- [60] A.S.Davydov. The soliton in protein molecules. Phys.Scr., 1979, 20: 387~396
- [61] A.S.Davydov. Nonlinear Fluctuation-Dissipation Relations. Phy.Stat. Sol.(b), 1973, 59: 465~479
- [62] L.D.Landau. Quantum mechanics. Pergamon Press. Oxford, 1987.
- [63] P.B. Burt. Energy bands in nonlinear schrödinger equations. Phys. Lett. A, 1979, 71: 19~28
- [64] P.B. Burt. Solitary waves in nonlinear field theories. Phys.Rev. Lett., 1974, 32: 1080~1083
- [65] G.B.Witham. Linear and Nonlinear Waves. Wiley, New York, 1975.
- [66] J.D.Borken. Relativistic Quantum Mechanics. McGraw-Hill, New York, 1964.
- [67] J.D.Borken. Relativistic Quantum Field. McGraw-Hill, New York, 1965.
- [68] P.B.Burt, Solutions of the Sine Gordon Equation, Phys. Lett., 1979: 82B: 423
- [69] Pang Xiao-Feng. Features of motion of soliton transported bio-energy in aperiodic alpha-helix protein molecules with three channels.Commun. Theor. Phys., 2009, 51:170~180
- [70] R.H.Stolen. Self-phase-modulation in silica optical fibers, Phys. Rev. A, 1978, 17: 1448~1456;
- [71] A. D. Barut. Nonlinear equations in physics and mathematics. D.Reidel, Dordrecht, 1978.
- [72] E.Fermi. Elementary particles, Yale, New Haven, 1951.
- [73] R.P Feynman. Quantum mechanics and path integrals. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [74] W. Heisenberg. Introduction to the unified field theory of elementary particles. Interscience, London, 1966.
- [75] A.Erdely. Bateman Manuscript Project. McGraw-Hill, New York. 1953.
- [76] R.C.Davidson. Methods in Nonlinear Theory. Academic, New York. 1972.
- [77] A.S. Davidson. Excitation states of the field with inertial self-action. preprint TTP-112R, inst. Theo. Phys. Kiev, 1981.
- [78] H. Frohlich. Theory of superconductive states. Phys. Rev., 1950, 79:845~854
- [79] H. J. Keller. Low Dimensional Conductive Phenomena. Plenum Press, New York, 1974.
- [80] H. Schuster. One-dimensional Conductors. Springer, Berlin, 1975.
- [81] A.C.Scott. Christiansen. Self-trapping of Vibrational Energy. Plenum Press, New York, 1990.
- [82] F. Abdullaev. Optical soliton, Springer, Berlin, 1994.
- [83] A.C. Scott. Dynamics of Davydov soliton. Phys. Rev. A, 1982, 26: 578~595
- [84] F. M. Mitschke, Discovery of the soliton self-frequency shift, Opt. Lett. 1986, 11:659~661
- [85] H. Frohlich. On superconductivity theory, one-dimensional case. Proc. Roy. Soc. London, Ser. A 1954, 223: 296~307
- [86] L. S. Brizhik. Soliton generation in molecular chains. Phys. Rev. B, 1993, 48:3142~3144
- [87] L.S. Brizhik, The ground state of an extra electron interacting with acoustic phonons in a molecular chain, Phys. Stat. Sol.(b), 1983, 115: 615~621

- [88] J. M. Hyman. Dynamics of Davydov solitons. Phys. Rev. A, 1982, 26:578~595
- [89] L. N. Bardeen. Microscopic Theory of Superconductivity. Phys. Rev. 1957, 106:162~164
- [90] L. N. Bardeen. Theory of Superconductivity. Phys. Rev. 1957, 108:1175~1201
- [91] N. N. Bogoliubov. Quantum Statistics. Nauka, Moscow, 1949.
- [92] P. G. Gennes. Superconductivity of metal and alloys. W. A. Benjamin, New York, 1966.
- [93] V. L. Ginzberg. Problems in high-temperature superconductivity. Nauka, Moscow, 1977.
- [94] R.J.Donnely. Quantum vortices in heliium II. Cambridge University Press, Cambridge,1991
- [95] R. C. Huepe. Subcritical Dissipation in Three-Dimensional Superflows. Phys. Rev., 2000, 140: 126~134
- [96] J. L. Jacobs, Monte Carlo renormalization-group studies of q-state Potts models in two dimensions. Phys. Rev. B, 1980, 21: 4094~4107
- [97] H. G. Kaper. Ginzburg-Landau dynamics with a time-dependent magnetic field nonlinearity. 1998, 11(2): 291~305.
- [98] Yu. S. Kivshar. Dynamics of solitons in nearly integrable systems. Rev. Mod. Phys., 1989, 61: 763~905
- [99] G. L. Lamb. Phase variation in coherent-optical-pulse propagation. Rev. Theor. Phys, 1974, 43: 151~159
- [100] J. C Wheatley. Experimental properties of superfluid ^3He . Rev. Mod. Rhys, 1975, 47: 415~470
- [101] J. R. Schrieffer. Theory of Superconductivity. Benjamin, New York, 1964.
- [102] C. F. Barenghi. Quantum vortex dynamics and Superfluid. turbulemce, Springer, Berlin, 2001.
- [103] R. J. Donnely. Quantum Vortices in heliium II. Cambridge. Vniversity press, Cambridge, 1991.
- [104] B. G. Konopelchenko. Nonlinear integrable equations. springer, Berlin 1987; Solitons in multidi- mentions, World Scientific, Singapore, 1995.
- [105] J. Potter. Quantion mechanics. North-Holland, Amsterdam, 1970.
- [106] R.. K. Bullough. Solitions, Springer-Verlag, Belin, 1980.
- [107] L. D. Faddeev. Hamiltonian Methods in the Theory of Solution. Springer, Berlin, 1987.
- [108] V. E. Zakharov and A. B. Shabat, An exact theory of one-dimensional self-modulation of waves in nonlinear media, Sov. Phys. JETP, 1972, 34: 62~78
- [109] V. E. Zakharov and A. B. Shabat, On the interaction of solitons in a stable medium., Sov. Phys. JETP, 1973, 37: 823~836
- [110] R.. M. Miura, Backland, transformatins and the in verse Scattering method, Solition and their applications. Spinger, Berlin, 1925.
- [111] C. Sulem. The nonlinear Schrödinger equation, Self-focusing and wave collapse, Spinger-Verlag, Berlin, 1999.

-
- [112] Lee. T. D. Quantum expansion of soliton solutions. Phys. Rev. D, 1975, 12: 1606
 - [113] Y. Lai. Quantum theory of solitons in optical fibers. I. time-dependent Hartree approximation. Phys. Rev. A, 1975, 40: 844~854.
 - [114] S. Weinberg, Precision tests of quantum mechanics. Phys. Rev. A. 1991, 43: 836~3843
 - [115] E. Alfinito. Nonlinear physics, theory and experiment, world Scientific, Singapore. 1996.
 - [116] M. J. Ablowitz. Solitons and inverse Scattering transform. SIAM. Philadelphia, 1981.
 - [117] M. J. Ablowitz. Newell and H. Segur, Method for solving the sine-Gordon equation. Phys. Rev. Lett., 1973, 30: 1262~1265
 - [118] V. G. Makhankov. Non-linear effects in quasi-one-dimensional models of condensed matter theory. Phys. Rep. 1984, 104: 1~76
 - [119] A. C. Scott. Davydov's soliton. Phys. Rep. 1992, 217: 1~67
 - [120] T. D. Bjorken. Relativistic quantum field. McGraw-Hill, New York. 1980.
 - [121] R. K. Dodd. Solitons and nonlinear wave equation, Academic press. London, 1984.
 - [122] R. S. Drazin. Solitons, an introduction. Cambridge University Press, Cambridge, 1980.
 - [123] J. C. Eilbeck. Soliton structure in crystalline acetanilide. Phys. Rev. B, 1984, 30: 4703
 - [124] H. Kleinert. Critical properties of soliton theory, world Scientific. Singapore, 2001.
 - [125] F. Abdullaev. Theory of solitons in inhomogeneous media, Wiley and Sons. New York. 1994.
 - [126] F. Abdullaev. Nonlinearity with disorder, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
 - [127] F. Abdullaev. Optical. Solitons. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
 - [128] K. E. Lonngren, Soliton experiments in plasmas. Plasma Phys, 1983, 25: 943.
 - [129] K. E. Lonngren and A. C. Scott. Solitons in action. Academic, New York, 1978.
 - [130] K. E. Lonngren. Soliton reflection and transmission at an interface. Phys. Lett. A, 1991, 156: 441~447
 - [131] A. B. Aceves. Theory of light-beam propagation at nonlinear interfaces. I. Equivalent-particle theory for a single interface. Phys. Rev. A 1989, 39:1809-1815 and 1839~1846
 - [132] V. V. Konotop, Nonlinear Schrodinger equation with random initial conditions at small correlation radii. Phys. Lett. A, 1990, 146: 50~61
 - [133] D. W. Aosey. Bandwidth limits due to incoherent soliton interaction in optical-fiber communication systems. Phys. Rev. A, 1985, 32: 2270~2277
 - [134] H. H. Chen. Nonlinear wave and soliton propagation in media with arbitrary inhomogeneities. Phys. Fluid, 1978, 21: 377~383
 - [135] H. H. Chen and C. S. Liu. Solitons in Nonuniform Media. Phys. Rev. Lett, 1976, 37:693
 - [136] J. L. Cooney. Experiments on Korteweg-de Vries solitons in a positive ion-negative ion plasma. Phys. Fluids, 1991, B3 :2758~2764.

- [137] C. Desem and P. L. Chu. Soliton interaction in the presence of loss and periodic amplification in optical fibers. *Opt. Lett.*, 1987, 12: 349~356
- [138] J. R. Taylor. *Optical soliton theory and experiment*. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.
- [139] Ya. B. Gaididei. Nonlinear excitations in two-dimensional molecular structures with impurities. *Phys. Rev. E*, 1995, 52: 2951~2963.
- [140] P. D. Lax, *Commun. Integrals of nonlinear equations of evolution and solitary waves*. Pure and Appl. Math. 1968, 21: 467~483
- [141] G. L. Lamb, *Elements of soliton theory*, Wiley, New York, 1980
- [142] Q. Scharf and A. R. Bishop, Properties of the nonlinear Schrödinger equation on a lattice. *Phys. Rev. A*, 1991, 43: 6535~6542
- [143] B. Tan and J. P. Boyd. Davydov Soliton Collisions. *Phys. Rev. A*, 1998, 240: 282~291
- [144] H. Frauenkron. Multisoliton collisions in nearly integrable systems. *Phys. Rev. E*, 1996, 54: R2244~R2249
- [145] Z. Fei. Resonant kink-impurity interactions in the ϕ^4 model. *Phys. Rev. A*, 1992, 46: 5214~5221
- [146] V. I. Karpman. A perturbational approach to the two-soliton systems. *Physica D*, 1981, 3: 487~495
- [147] S. Takano. Equivalence of a harmonic oscillator to a free particle. *Prog. Theor. Phys.*, 1990, 84: 1019~1029
- [148] S. Takano, Quantum dynamics and non-inertial frames of reference. I. Generality. *Theor. Phys.*, 1991, 85: 463~471
- [149] Quantum dynamics and noninertial frames of reference. II. Harmonic oscillators. *Prog. Theor. Phys.* 85 (1991) 723~731
- [150] S. Takano, Electromagnetic Steering of Charged Nonlinear Schrödinger Solitons, *Phys. Lett. A*, [1991, 160: 251~263
- [151] V. E. Zakharov. *Theory of Soliton problem*. New York. 1984.
- [152] I. V. Barashenkov. Soliton-like bubbles" in a system of interacting bosons. *Phys. Lett. A*, 1988, 128: 52~66
- [153] A. Hasegawa. Guiding-center soliton. *Opt. Lett.*, 1983, 8: 342,
- [154] A. Hasegawa. *Optical solitons in fiber*. Springer Verlag, Berlin, 1989.
- [155] A. S. Davydov, A theory of the motion of an extra electron in quasi-one-dimensional structures, *Phys. Stat. Sol. (b)* 1980, 102: 275~293
- [156] R. C. Davidson. *Methods in nonlinear plasma theory*, Academic Press, New York. 1972.
- [157] L. S. Brizhik. Soliton excitations in one-dimensional molecular systems, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1983, 115: 615~632

- [158] L. F. Mollenauer. Demonstration of soliton transmission over more than 4000 km in fiber with loss periodically compensated by Raman gain. *Opt. Lett.*, 1988, 13: 675~681
- [159] L. F. Mollenauer and K. Smith, Experimental observation of soliton interaction over long fiber paths: discovery of a long-range interaction. *Opt. Lett.*, 1989, 14: 1284~1290
- [160] L. F. Mollenauer. Experimental observation of picosecond pulse narrowing and solitons in optical fibers. *Phys. Rev. Lett.*, 1980, 45:1095~1098
- [161] P. K. Dodd. Solitons and nonlinear wave equation, Academic Press, London. 1984.
- [162] D. Baeriswyl. Solitons and polarons in solid state physics. World Scientific Singapore, 1992.
- [163] G. Eilenberger. Solitons: mathematical methods for physicists. Springer-Verlag, Berlin. 1981.
- [164] M. B. Fogel. Classical particlelike behavior of sine-Gordon solitons in scattering potentials and applied fields. *Phys. Rev. Lett.*, 1976, 36:1411~1414
- [165] M. B. Fogel. Dynamics of sine-Gordon solitons in the presence of perturbations. *Phys. Rev. B*, 1977, 15: 1578~1585
- [166] R. Hirota. Exact solution of the Korteweg-de Vries equation for multiple collisions of solitons. *Phys. Rev. Lett.*, 1971, 27:1192~1195
- [167] R. Hirota. Exact envelope-soliton solutions of a nonlinear wave equation. *J. Math. Phys.*, 1973, 14:805~623
- [168] R. Hirota. Nonlinear evolution equations generated from the Backlund transformation for the Boussinesq equation. *Prog. Theor. Phys.*, 1977, 57:797~803
- [169] K. Konno. Simple Derivation of Backlund Transformation from Riccati Form of Inverse Method. *Prog. Theor. Phys.*, 1975, 53: 1652~1665
- [170] K. Konno. Some remarkable properties of two loop soliton solutions. *J. Phys. Soc., Japan*, 1983, 52: 1~12
- [171] B. A. Malomed. Emission from a small-amplitude sine-gordon breather under the action of a conservative perturbation. *Phys. Lett. A*, 1984, 102: 83~94
- [172] B. A. Malomed. Emission from, WKB quantization, and stochastic decay of sine-Gordon solitons in external fields. *Phys. Lett. A*, 1987, 120: 28~39
- [173] B. A. Malomed. Perturbation-induced radiative decay of solitons. *Phys. Lett. A*, 1987, 123: 459~367
- [174] B. A. Malomed. Evolution of nonsoliton and “quasi-classical” wavetrains in nonlinear Schrödinger and Korteweg-de Vries equations with dissipative perturbations. *Physica D*, 1987, 24:155~168
- [175] B. A. Malomed. Emission from, quasi-classical quantization, and stochastic decay of sine-Gordon solitons in external fields. *Physica D*, 1987, 27: 113~126
- [176] B. A. Malomed. Interaction of a moving dipole with a soliton in the KdV equation. *Physica D*, 1988, 32:393~415

- [177] B. A. Malomed. Dynamics of a fluxon in a long josephson junction with a periodic lattice of inhomogeneities. Phys. Rev. B, 1988, 38: 9242~9256
- [178] D. J. Kaup. Theory of nonlinear oscillating dipolar excitations in one-dimensional condensates. Phys. Rev. B, 1978, 18:5162~5172
- [179] S. K. Liu. Nonlinear equations in physics. Beijing University Press, Beijing, 2000.
- [180] J.J.C. Nimmo. A bilinear Bäcklund transformation for the nonlinear Schrödinger equation. Phys. Lett. A, 1983, 99: 279~290.
- [181] M. Lakshwanan. Solitons, introduction and application. Springer-Verlag, Berlin, 1988.
- [182] C. Rogers. Application of linked Backlund transformations to nonlinear boundary value problems. J.Math.Phys., 1985, 26:393~401
- [183] C. Rogers. Reciprocal transformations in (2+1) dimensions. J.Phys.A, 1986,19:L491~L496
- [184] C.Rogers. Application of a reciprocal transformation to a two phase stefan problem. J. Phys. A, 1986,18: L105~112.
- [185] C. Rogers. Backlund transformations and their applications. Academic Press, New York, 1982.
- [186] M. Tajiri. Similarity reductions of the one and two dimensional nonlinear Schrödinger equations. J.Phys. Soc. Japan, 1983, 52:1908~1916
- [187] M. Tajiri. Reduction to the second painlevé equation and N-soliton solutions of the three-dimensional nonlinear Schrödinger equation. J.Phys. Soc. Japan, 1984, 53:1634~1642.
- [188] Chen Xiang-rong. Calculation of stretching vibrational overtones and combinations of arsine by nonlinear model. Acta Physical Sinica, 1998, 9(5):108~117
- [189] Chen Xiang-rong. High-lying vibrational spectrum of ammonia via non linear quantum theory, Commun. Theor. Phys., 1999, 31: 169~178
- [190] 庞小峰. 水的非线性振动能谱的自陷理论计算. 物理学报, 1994, 43:1987~1996